

## Grau en Matemàtiques

---

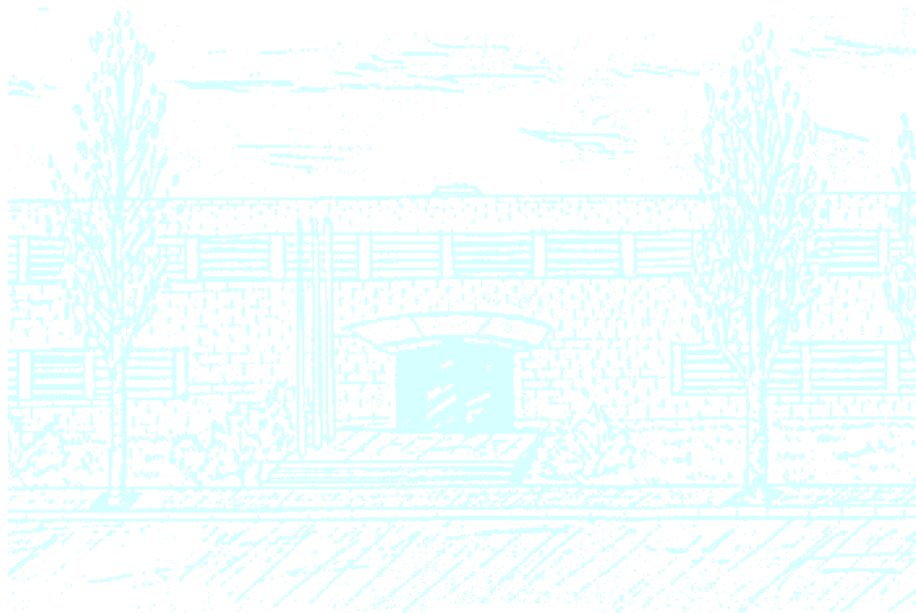
**Títol:** Solució pel mètode dels elements finits de materials electroactius

**Autor:** Mariona González Esteve

**Director:** Sonia Fernández-Méndez, Amir Abdollahi Hosnijeh

**Departament:** Enginyeria Civil i Ambiental

**Convocatòria:** Juny 2020





Universitat Politècnica de Catalunya  
Facultat de Matemàtiques i Estadística

Grau en Matemàtiques  
Treball de Fi de Grau

# **Solució pel mètode dels elements finits de materials electroactius**

**Mariona González Esteve**

Supervisat per Sonia Fernández-Méndez i Amir Abdollahi Hosnijeh

Juny, 2020



Gràcies a la Sonia i a l'Amir, per l'ajuda, les explicacions i el temps proporcionats. També als meus familiars i amics que m'han cuidat durant aquests mesos, encara que fos des de la distància, i en especial al meu pare per compartir el confinament amb mi.



## Resum

Els materials electroactius són materials que generen un camp elèctric quan se'ls hi aplica una tensió que els deforma, i viceversa. En aquest treball es fa un anàlisi matemàtic d'aquest fenomen en els materials piezoelèctrics (els materials electroactius més coneguts), resolent el sistema d'equacions de la modelització de la piezoelectricitat amb el mètode dels elements finits. També s'estudien dues possibles aplicacions: la vàlvula piezoelèctrica i la cel·la fotovoltaica piezoelèctrica.

## Paraules clau

Piezoelectricitat, Elements finits, Sensor, Actuador, Vàlvula, Cèl·lula fotovoltaica.

# Índex

<b>1</b>	<b>Introducció</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Model de la piezoelectricitat i discretització</b>	<b>5</b>
<b>3</b>	<b>Verificació del codi</b>	<b>9</b>
<b>4</b>	<b>Verificació física del model</b>	<b>10</b>
4.1	Sensor piezoelèctric . . . . .	10
4.2	Actuador piezoelèctric . . . . .	12
<b>5</b>	<b>Aplicació: vàlvula</b>	<b>14</b>
5.1	Model <i>bimorph</i> . . . . .	14
5.2	Model <i>unimorph</i> . . . . .	15
<b>6</b>	<b>Canvi de direcció en el tensor piezoelèctric</b>	<b>17</b>
<b>7</b>	<b>Aplicació: cèl·lula fotovoltaica</b>	<b>20</b>
7.1	Modelització i discretització . . . . .	20
7.2	Verificació del codi . . . . .	23
<b>8</b>	<b>Comentaris finals i conclusions</b>	<b>25</b>
8.1	Conclusions i treball futur . . . . .	25
8.2	Aprenentatge personal . . . . .	26
<b>9</b>	<b>Referències</b>	<b>27</b>
<b>A</b>	<b>Codis de Maple</b>	<b>28</b>
A.1	Càlcul de $\mathbf{b}$ i $q$ . . . . .	28
A.2	Càlcul de $s_p$ i $s_n$ . . . . .	28
<b>B</b>	<b>Codis de MATLAB</b>	<b>29</b>
B.1	Fitxer principal del codi piezoelèctric . . . . .	29
B.2	Càlcul del sistema piezoelèctric . . . . .	32
B.3	Fitxer principal del codi de la cèl·lula fotovoltaica piezoelèctrica . . . . .	33
B.4	Càlcul del sistema de convecció-difusió . . . . .	34
B.5	Càlcul del sistema piezoelèctric de la cèl·lula fotovoltaica . . . . .	35



# 1. Introducció

Actualment, els materials electroactius són molt utilitzats i és per això que és important el seu estudi, per poder anar trobant noves aplicacions i aprofitar els seus beneficis de manera més sostenible. En aquest treball s'estudiarà el fenomen de la piezoelectricitat, que és un cas particular dels materials electroactius.

Els materials piezoelèctrics són coneguts i utilitzats per les seves dues característiques principals. La primera és que al sotmetre'ls a una deformació, ja sigui apretant-los, tibant-los o regirant-los, generen un camp elèctric. La segona, és justament el fet invers, que quan se'ls hi aplica una diferència de potencial elèctric es deformen. Quan aquests materials són usats per aprofitar la seva primera característica, se'ls anomena sensors piezoelèctrics. En el cas que s'utilitzin pel segon motiu, són actuadors piezoelèctrics.

Aquests dos fenòmens succeeixen degut a la composició del material piezoelèctric. Encara que l'estructura que segueixen les seves partícules no és simètrica, les càrregues elèctriques es troben situades de tal manera que el camp elèctric és nul. Aquesta no simetria és la clau, ja que és la que fa que, al modificar la forma del material, les càrregues elèctriques interiors perdin la simetria inicial entre elles i ho compensin generant una diferència de potencial als costats de la peça piezoelèctrica. Pel mateix motiu, quan s'hi aplica un camp elèctric, les càrregues també perden l'estabilitat i forcen al material a deformar-se per adaptar-se i aconseguir un nou equilibri.

La primera propietat piezoelèctrica descrita va ser descoberta per Pierre i Jacques Curie el 1880, quan investigaven diferents cristalls. La segona va ser deduïda matemàticament un any després pel físic Gabriel Lippmann i a continuació, comprovada experimentalment pels germans Curie. A partir de llavors, la piezoelectricitat es va mantenir només com un efecte curiós fins que, per la primera guerra mundial, es van utilitzar cristalls piezoelèctrics per la creació de sonars i més endavant per transmissors de radio. Durant la segona guerra mundial, es va estudiar com modificar materials ceràmics per convertir-los de manera sintètica en piezoelèctrics i així obtenir uns valors més potents que amb els materials piezoelèctrics naturals.<sup>[1, 2]</sup> Des de la finalització de la segona guerra mundial, s'han anat trobant més aplicacions fins arribar a avui en dia, on la piezoelectricitat és present en diferents objectes d'ús diari.

Algunes de les seves aplicacions actuals són, entre altres:

- Relotges de quars. Utilitzen el quars com a actuator ja que al rebre la càrrega elèctrica proporcionada per la pila, oscil·la amb una freqüència determinada que es pot transformar en una pulsació elèctrica per segon.
- Encenedors elèctrics. Sota el polsador hi ha un cristall piezoelèctric que fa de sensor. Al rebre la pressió del botó, s'aprofita el camp elèctric per generar una espurna que encengui el gas de l'interior de l'encenedor. Es pot veure el funcionament en la Figura 1.
- Pastilles de les guitarres elèctriques. Situades en el pont de la guitarra, exerceixen d'amplificador al ser sensors que aprofiten la seva deformació, deguda a la vibració de les cordes, per enviar una senyal elèctrica.
- Teclats. Sota cada tecla hi ha un sensor que es deforma al prémer-la i envia una senyal elèctrica que informa de quina tecla s'ha premut.
- Vàlvules d'ús mèdic. Actuadors que es deformen al aplicar-lis un camp elèctric per deixar passar una substància que estan bloquejant en la seva posició inicial.

- Plaques solars. Cada cel·la és un sensor piezoelèctric que, al deformar-lo, fa que s'obtingui més energia elèctrica de la que s'obtingria en una cel·la solar sense cap material piezoelèctric.

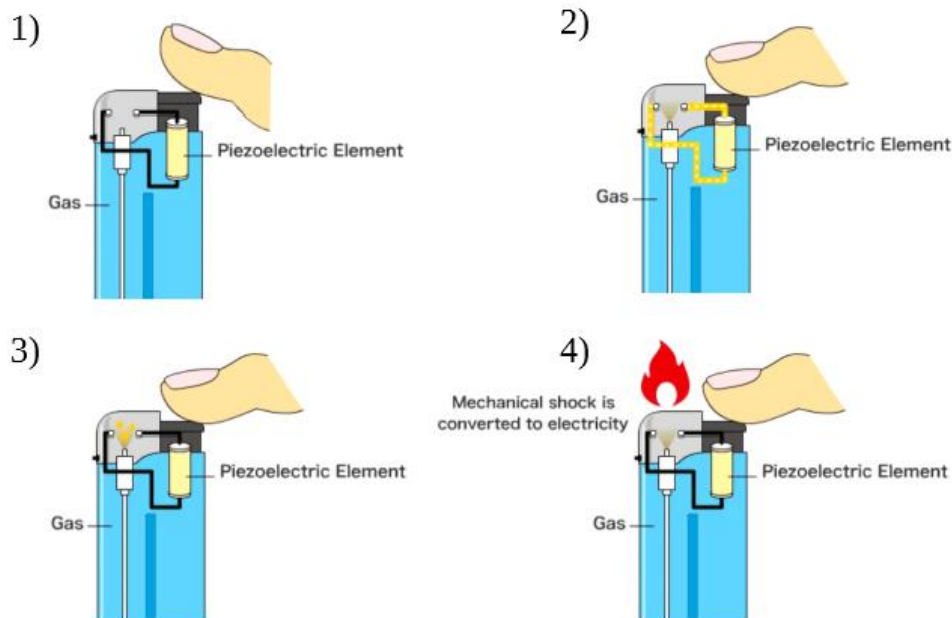


Figura 1: Funcionament d'un encenedor elèctric que aprofita les propietats de la piezoelectricitat.<sup>[3]</sup>

Aquest treball se centrarà en fer un anàlisi matemàtic del fenomen de la piezoelectricitat, ja que és la base per poder estudiar-lo, entendre millor els seus efectes i avançar en aquest camp. Per modelar matemàticament el comportament de la piezoelectricitat són necessàries equacions en derivades parcials de segon ordre que tinguin en compte tant la part mecànica com l'elèctrica i de manera conjunta, ja que l'una depèn de l'altra.

El treball s'organitza de la manera següent. En la secció 2 es presenta la modelització del material piezoelèctric i s'explica com trobar la solució numèrica amb el mètode dels elements finits. Després, en 3 es verifica que el codi implementat funciona correctament amb la convergència esperada. L'apartat 4 presenta dos exemples amb els que es pot veure com es comporten un sensor piezoelèctric i un actuador piezoelèctric. Seguidament, en 5 es mostra el funcionament d'una possible aplicació com a vàlvula. A l'apartat 6, es veu la importància de la direcció principal de la piezoelectricitat. Com a part addicional, un cop s'han assolit els objectius del treball, en la secció 7 s'estudia la modelització d'una cèl·lula fotovoltaica que utilitza la piezoelectricitat pel seu funcionament. Per acabar, es fan uns comentaris finals en 8.

Per poder dur a terme aquest treball s'ha utilitzat el llenguatge de programació MATLAB per implementar els codis (Annex B) i el programa Maple per realitzar càlculs simbòlics (Annex A). Totes les imatges de les següents seccions són creació pròpia.

## 2. Model de la piezoelectricitat i discretització

La característica principal d'un material piezoelèctric és el seu comportament electromecànic acoblat. Les equacions en derivades parcials de segon ordre adients per reproduir aquest procediment són l'equació d'elasticitat lineal, per representar l'equilibri mecànic, i la de Poisson, per incloure la part electrostàtica, totes dues acoblades.

Pel desenvolupament d'aquest treball, s'assumiran hipòtesis de petites deformacions pel problema mecànic. A més, es consideraran deformacions planes, és a dir, s'utilitzarà l'equació d'elasticitat lineal en dues dimensions.

Siguin  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ,  $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_x \\ u_y \end{bmatrix}$  els desplaçaments horitzontals i verticals de cada punt respecte la seva posició original i  $\phi$  el potencial elèctric sota el que es troba cada punt del cos. Aleshores, la modelització de la piezoelectricitat és:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \hat{\sigma} + \mathbf{b} = \mathbf{0} \\ \nabla \cdot \hat{\mathbf{D}} - q = 0 \end{cases} \quad \text{en } \Omega \quad (1)$$

on  $\hat{\sigma} = \underline{\mathbb{C}} : \hat{\varepsilon}(\mathbf{u}) + \underline{\mathbb{A}} : \nabla \phi$  és el tensor de tensions (sent  $\underline{\mathbb{C}}$  un tensor de quart ordre que depèn dels paràmetres del material,  $\hat{\varepsilon}(\mathbf{u})$  el tensor de deformacions i  $\underline{\mathbb{A}}$  el tensor piezoelèctric de tercer ordre),  $\mathbf{b}$  són les forces externes,  $\hat{\mathbf{D}} = -\mathbf{k} \cdot \nabla \phi + \underline{\mathbb{A}} : \hat{\varepsilon}(\mathbf{u})$  és el desplaçament elèctric (sent  $\mathbf{k}$  el tensor dielèctric de segon ordre,  $\underline{\mathbb{A}}$  el tensor piezoelèctric de tercer ordre i  $\hat{\varepsilon}(\mathbf{u})$  el tensor de deformacions) i  $q$  és la càrrega elèctrica lliure.

Com es pot veure, el tensor piezoelèctric  $\underline{\mathbb{A}}$  és el component que uneix el comportament mecànic amb l'elèctric. Si  $\underline{\mathbb{A}}$  és nul, les equacions de (1) es desacoblen i queden una equació d'elasticitat lineal i una de Poisson normals.

El problema a resoldre es completa amb les condicions de contorn de Dirichlet i de Neumann

$$\begin{cases} \mathbf{u} = \mathbf{u}_D & \text{a } \Gamma_D^u \\ \hat{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} & \text{a } \Gamma_N^u \end{cases} \quad \text{on } \Gamma_D^u \cup \Gamma_N^u = \partial\Omega$$

$$\begin{cases} \phi = \phi_D & \text{a } \Gamma_D^\phi \\ \hat{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{a } \Gamma_N^\phi \end{cases} \quad \text{on } \Gamma_D^\phi \cup \Gamma_N^\phi = \partial\Omega \quad (2)$$

on  $\partial\Omega$  és la vora del cos,  $\mathbf{n}$  és el vector normal unitari i  $\mathbf{u}_D$  i  $\phi_D$  són dades donades inicialment.

Ara, es procedeix a deduir la forma feble del problema (1) amb condicions de contorn (2). Per començar, es multipliquen les dues equacions del sistema per unes funcions test  $\mathbf{v}$  i  $w$  qualssevol, respectivament, i s'integren totes dues en  $\Omega$ :

$$\int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot (\nabla \cdot \hat{\sigma}) d\Omega = - \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} d\Omega \quad \forall \mathbf{v},$$

$$\int_{\Omega} w \nabla \cdot \hat{\mathbf{D}} d\Omega = \int_{\Omega} w q d\Omega \quad \forall w.$$

Després, tenint en compte les fórmules d'integració per parts

$$\int_{\Omega} \mathbf{g} \cdot (\nabla \cdot \mathbf{f}) d\Omega = - \int_{\Omega} \nabla \mathbf{g} : \mathbf{f} d\Omega + \int_{\partial\Omega} \mathbf{g} \cdot (\mathbf{f} \cdot \mathbf{n}) d\Gamma, \quad (3)$$

$$\int_{\Omega} g \nabla \cdot \mathbf{f} d\Omega = - \int_{\Omega} \nabla g \cdot \mathbf{f} d\Omega + \int_{\partial\Omega} g \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} d\Gamma, \quad (4)$$

s'aplica (3) i (4) als termes de l'esquerra d'ambdues equacions, respectivament, quedant

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} : \hat{\boldsymbol{\sigma}} d\Omega + \int_{\partial\Omega} \mathbf{v} \cdot (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}) d\Gamma &= - \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} d\Omega \quad \forall \mathbf{v} \\ - \int_{\Omega} \nabla w \cdot \hat{\mathbf{D}} d\Omega + \int_{\partial\Omega} w \hat{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{n} d\Gamma &= \int_{\Omega} w q d\Omega \quad \forall w \end{aligned}$$

Si s'apliquen les condicions de contorn (2) i es té en compte que  $\nabla \mathbf{v} = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{v}) + \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} - \nabla \mathbf{v}^T)$  i que  $(\nabla \mathbf{v} - \nabla \mathbf{v}^T) : \hat{\boldsymbol{\sigma}} = 0$  per a  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  simètric i  $(\nabla \mathbf{v} - \nabla \mathbf{v}^T)$  antisimètric, la forma feble queda

“Trobar  $\mathbf{u} \in [H^1(\Omega)]^2$  tal que  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_D$  i  $\phi \in H^1(\Omega)$  tal que  $\phi = \phi_D$  en el contorn de Dirichlet  $\Gamma_D$  i

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{v}) : \hat{\boldsymbol{\sigma}} d\Omega &= - \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} d\Omega \\ - \int_{\Omega} \nabla w \cdot \hat{\mathbf{D}} d\Omega &= \int_{\Omega} w q d\Omega \end{aligned} \quad (5)$$

$\forall \mathbf{v} \in [H^1(\Omega)]^2$  tal que  $\mathbf{v} = \mathbf{0}$  i  $\forall w \in H^1(\Omega)$  tal que  $w = 0$  a  $\Gamma_D$ .”

Abans de fer la discretització de la forma feble, s'aplica la notació de Voigt per transformar els tensors simètrics a vectors, i d'aquesta manera reduir la complexitat dels càlculs.

Les components del tensor de tensions són  $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} \end{bmatrix}$ , on  $\sigma_{xx}$  i  $\sigma_{yy}$  són les traccions o compressions i  $\tau_{xy} = \tau_{yx}$  és la torsió. I les del tensor de deformacions són  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \gamma_{xy} \\ \gamma_{yx} & \varepsilon_{yy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_x}{\partial x} & \frac{1}{2}(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}) \\ \frac{1}{2}(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}) & \frac{\partial u_y}{\partial y} \end{bmatrix}$ , on  $\varepsilon_{xx}$  i  $\varepsilon_{yy}$  representen els allargaments o escurçaments i  $\gamma_{xy} = \gamma_{yx}$  el cisallament d'un cos.

Pel desenvolupament d'aquest treball, amb la notació de Voigt es canvia de  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  a  $\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \tau_{xy} \end{bmatrix}$  i de

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \text{ a } \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ 2\gamma_{xy} \end{bmatrix}.$$

Tenint en compte aquesta notació, l'equació constitutiva s'escriu com  $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) + \mathbf{A} \cdot \nabla \phi$ , on  $\mathbf{C} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{bmatrix}$ , que depèn dels paràmetres del material (el mòdul de Young  $E$  i el coeficient de Poisson  $\nu$ ) i  $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{111} & a_{122} & a_{112} \\ a_{211} & a_{222} & a_{212} \end{bmatrix}$  és el tensor piezoelèctric.

El tensor piezoelèctric es construeix en base a una direcció principal i està format per tres components: l'acoblament longitudinal  $a_L$ , l'acoblament transversal  $a_T$  i l'acoblament de cisallament  $a_S$ . Si es considera que la direcció principal de la piezoelectricitat és la de les abscisses, el tensor queda de la següent manera:  $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_L & a_T & 0 \\ 0 & 0 & a_S \end{bmatrix}$ .<sup>[4]</sup> Al llarg de tot el treball s'utilitzarà aquesta direcció, excepte en l'exemple de l'apartat 6, on s'avisarà del canvi.

Per altra banda, el desplaçament elèctric queda com  $\mathbf{D} = -k \nabla \phi + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})$ , on  $k$  és la constant dielèctrica i  $\mathbf{A}$  és el tensor piezoelèctric.

Així, usant la notació de Voigt, les equacions de la forma feble queden

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) \cdot (\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) + \mathbf{A} \cdot \nabla \phi) d\Omega &= - \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} d\Omega \\ - \int_{\Omega} \nabla w (-k \nabla \phi + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) d\Omega &= \int_{\Omega} w q d\Omega \end{aligned}$$

A continuació, es procedeix a discretitzar el problema per poder aproximar la seva solució aplicant el mètode dels elements finits. Siguin  $n$  el nombre de nodes dels que consta la malla que discretitza  $\Omega$ ,

$\mathbf{U} = [u_{x_1} \ u_{x_2} \ \dots \ u_{x_n} \ u_{y_1} \ u_{y_2} \ \dots \ u_{y_n}]^T$  el vector dels valors nodals del desplaçament,

$\boldsymbol{\Phi} = [\phi_1 \ \phi_2 \ \dots \ \phi_n]^T$  el vector dels valors nodals del potencial elèctric,

$\mathbf{V} = [v_{x_1} \ v_{x_2} \ \dots \ v_{x_n} \ v_{y_1} \ v_{y_2} \ \dots \ v_{y_n}]^T$  el vector dels valors nodals de la funció de test  $\mathbf{v}$ ,

$\mathbf{W} = [w_1 \ w_2 \ \dots \ w_n]^T$  el vector dels valors nodals de la funció de test  $w$  i

$\mathbf{N} = [N_1 \ N_2 \ \dots \ N_n]$  el vector de les funcions de forma.

Aleshores, es té:

$$\mathbf{u} \approx \mathbf{B}\mathbf{U}, \phi \approx \mathbf{N}\boldsymbol{\Phi}, \mathbf{v} = \mathbf{B}\mathbf{V}, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) \approx \mathbf{S}\mathbf{U}, \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}) = \mathbf{S}\mathbf{V}, \nabla \phi \approx (\nabla \mathbf{N})\boldsymbol{\Phi}, w = \mathbf{N}\mathbf{W} \text{ i } \nabla w = (\nabla \mathbf{N})\mathbf{W}$$

$$\text{on } \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{N} & 0 \dots 0 \\ 0 \dots 0 & \mathbf{N} \end{bmatrix}, \mathbf{S} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x} & 0 \dots 0 \\ 0 \dots 0 & \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial y} \\ \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial y} & \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x} \end{bmatrix} \text{ i } \nabla \mathbf{N} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x} \\ \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial y} \end{bmatrix}.$$

Finalment, se substitueixen les discretitzacions a la forma feble, simplificant  $\mathbf{V}^T$  i  $\mathbf{W}^T$  als dos costats de les equacions, i s'obté

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} \mathbf{S}^T (\mathbf{C}\mathbf{S}\mathbf{U} + \mathbf{A}^T \nabla \mathbf{N}\boldsymbol{\Phi}) d\Omega &= - \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{b} d\Omega \quad \forall \mathbf{v} \\ - \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}^T (-k \nabla \mathbf{N}\boldsymbol{\Phi} + \mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{U}) d\Omega &= \int_{\Omega} \mathbf{N}^T q d\Omega \quad \forall w \end{aligned}$$

D'on es pot deduir el sistema d'equacions a resoldre:

$$\mathbf{K} \begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \Phi \end{bmatrix} = \mathbf{f} \quad (6)$$

$$\text{on } \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\phi} \\ \mathbf{K}_{\phi u} & \mathbf{K}_{\phi\phi} \end{bmatrix}, \text{ amb } \mathbf{K}_{uu} = \int_{\Omega} -\mathbf{S}^T \mathbf{C} \mathbf{S} d\Omega, \quad \mathbf{K}_{u\phi} = \mathbf{K}_{\phi u}^T = \int_{\Omega} -\mathbf{S}^T \mathbf{A}^T \nabla \mathbf{N} d\Omega \quad \text{i}$$

$$\mathbf{K}_{\phi\phi} = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}^T k \nabla \mathbf{N} d\Omega \text{ i } \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 \end{bmatrix}, \text{ amb } \mathbf{f}_1 = \int_{\Omega} -\mathbf{B}^T \mathbf{b} d\Omega \quad \text{i} \quad \mathbf{f}_2 = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T q d\Omega.$$

Per a la implementació del codi, primer es fa el càlcul de les matrius i els vectors com si tots els nodes de la malla fossin incògnites, és a dir, ignorant les condicions de Dirichlet i acoblant les matrius i els vectors per tots els elements i sense casuística. Els valors prescrits als nodes dels contorns de Dirichlet s'imposen posteriorment modificant el sistema (6).

### 3. Verificació del codi

Un cop s'escriu el codi en MATLAB en base a la forma feble (5) i les discretitzacions explicades a l'apartat 2, es procedeix a verificar que el codi funciona correctament amb petits tests. Aquests tests es basen en proposar una solució analítica, donar uns valors específics a les constants  $E$ ,  $\nu$ ,  $k$  i  $\mathbf{A}$ , calcular  $\mathbf{b}$  i  $q$  a partir de la solució analítica i comprovar que l'error  $L^2$  convergeix com s'espera.

L'exemple exposat a continuació és un test amb una solució analítica no polinòmica. Donat el domini  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ , es considera

$$\begin{cases} u_x(x, y) = \sin(x^2 y) \\ u_y(x, y) = 2x^3 - yx \\ \phi(x, y) = y^2 - x \end{cases}$$

Els paràmetres utilitzats són:  $E = 152 \text{ Pa}$ ,  $\nu = 0.33$ ,  $k = 141 \text{ JV}^{-2}\text{m}^{-1}$  i  $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 8.8 & -4.4 & 0 \\ 0 & 0 & 4.4 \end{bmatrix} \text{ JV}^{-1}\text{m}^{-2}$ .

Amb l'ajuda de Maple (codi A.1), es troba que els termes independents de les dues equacions queden

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} (0.17x^4 + 2.68x^2y^2)336.13 \sin(x^2y) - 450.42y \cos(x^2y) + 159.27 \\ 336.13x(x^2y \sin(x^2y) - \cos(x^2y) - 2.04) \end{bmatrix}$$

$$q = 17.6y \cos(x^2y) - 35.2x^2y^2 \sin(x^2y) - 282 - 4.4x^4 \sin(x^2y)$$

Al substituir totes les components en el codi i executar-lo fent variar el nombre de nodes de la malla, fent-la cada vegada més fina, s'obtenen les següents gràfiques d'evolució de l'error, després de comparar la solució obtinguda amb la solució analítica donada.

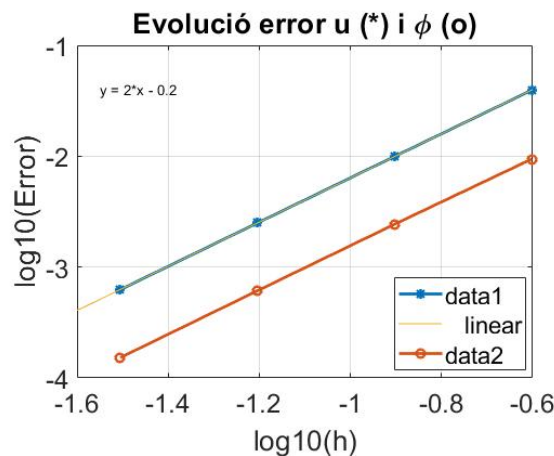


Figura 2: Evolució de l'error d' $u$  (data1) i de l'error de  $\phi$  (data2).

Les rectes de la Figura 2, les dues de pendent 2, ens mostren que el codi funciona bé ja que retornen la convergència quadràtica esperada, tant pels desplaçaments com pel potencial elèctric.

## 4. Verificació física del model

El següent pas és veure si el model utilitzat retorna uns resultats físics que es corresponen amb el que s'espera en la realitat. Es treballarà amb un exemple de sensor i un d'actuador.

### 4.1 Sensor piezoelèctric

Sigui un sensor piezoelèctric  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$  amb el lateral esquerre recolzat contra una superfície estàtica. Si se li aplica una força en el lateral dret per tal d'apretar-lo contra la superfície, aleshores s'espera que generi un camp elèctric.

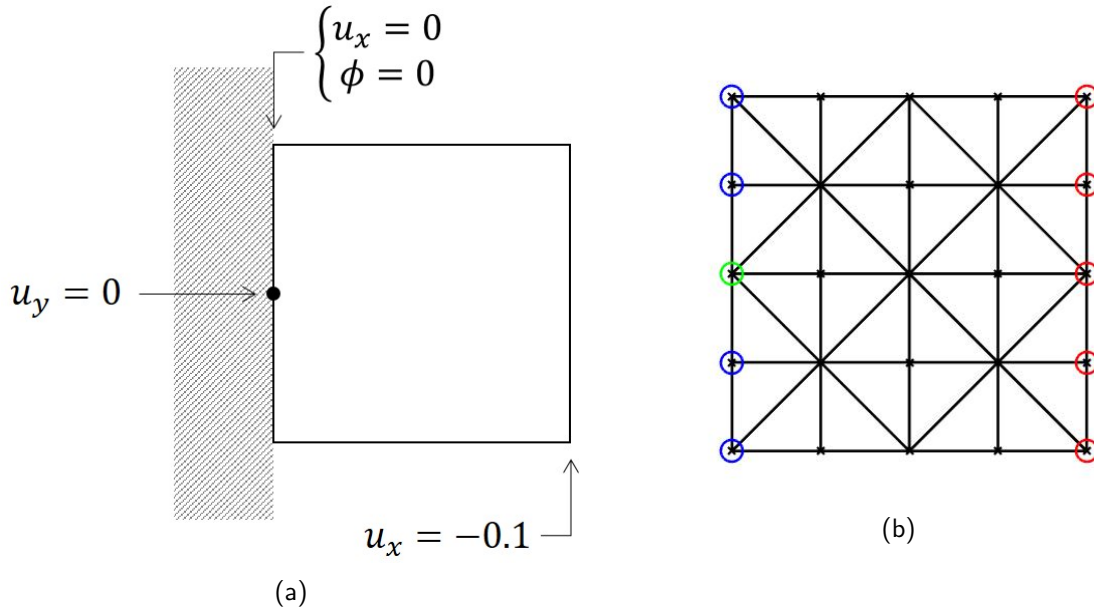


Figura 3: (a) Plantejament del problema del sensor, (b) Malla que discretitza el sensor amb els punts del contorn de Dirichlet remarcats.

Com a condicions de contorn, s'imposa que els punts del costat dret es mouen 0.1 a l'esquerra i que els punts del costat esquerre no varien la seva posició horitzontalment i no es troben sota cap potencial elèctric. A més, el punt mig de l'aresta esquerra també està bloquejat en la direcció vertical, per tal de tenir solució única. Altrament, si es deixés solt podrien haver translacions verticals rígides qualssevol.

Si s'utilitzen els paràmetres:  $E = 152 \text{ Pa}$ ,  $\nu = 0$ ,  $k = 141 \text{ JV}^{-2}\text{m}^{-1}$  i  $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 8.8 & -4.4 & 0 \\ 0 & 0 & 4.4 \end{bmatrix} \text{ JV}^{-1}\text{m}^{-2}$ , s'obtenen la deformació de la malla i el potencial mostrats en la Figura 4.

Com es pot observar, a l'aplicar la compressió el sensor s'escurça i es crea un camp elèctric, el potencial del qual disminueix d'esquerra a dreta linealment des de 0 V (valor imposat per les condicions inicials) fins arribar a un valor de  $-6.2 \cdot 10^{-3} \text{ V}$  en tot el lateral dret. Per no només verificar el bon funcionament de manera visual, s'assegura que els resultats són correctes calculant la polarització i veient que dona el mateix valor que el potencial elèctric dels punts de la dreta.



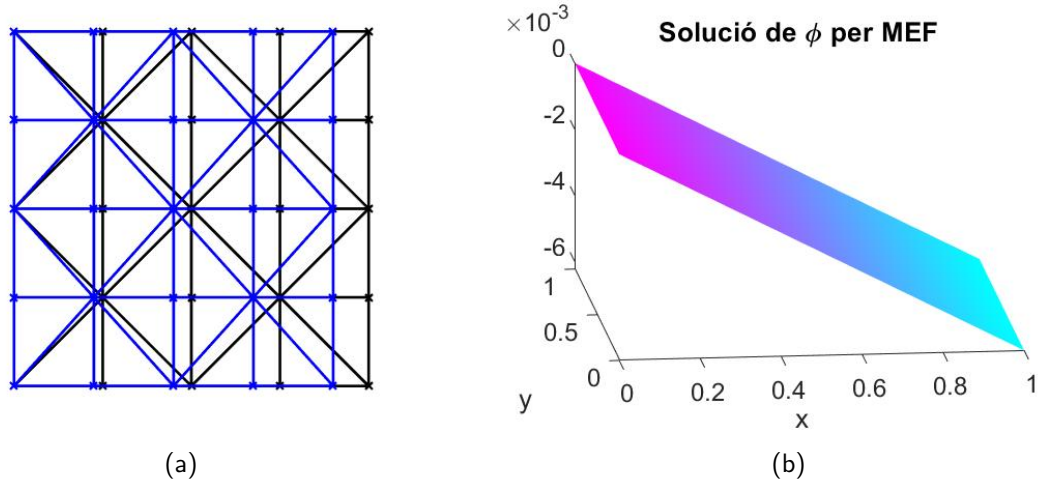


Figura 4: (a) Representació del sensor en la seva forma original (malla de color negre) i després d'aplicar la pressió (malla de color blau), (b) Potencial elèctric sota el que està cada punt del sensor.

La polarització es calcula partint de la condició de Neumann homogènia imposada al lateral dret:

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0$$

$$(-k \nabla \phi + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \mathbf{n} = 0$$

$$\left( -k \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_L & a_T & 0 \\ 0 & 0 & a_S \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ 2\gamma_{xy} \end{bmatrix} \right) \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -k \frac{\partial \phi}{\partial x} + a_L \varepsilon_{xx} + a_T \varepsilon_{yy} \\ -k \frac{\partial \phi}{\partial y} + 2a_S \gamma_{xy} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$-k \frac{\partial \phi}{\partial x} + a_L \varepsilon_{xx} + a_T \varepsilon_{yy} = 0$$

Al ser un problema uniforme, es té  $\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_{dreta} - \phi_{esquerra}}{L}$ ,  $\varepsilon_{xx} = \frac{u_{x,dreta} - u_{x,esquerra}}{L}$  i  $\varepsilon_{yy} = \frac{u_{y,superior} - u_{y,inferior}}{L}$ , on  $L$  és la longitud del costat del cos, que en aquest cas és 1. Si se substitueixen els valors pels donats en el problema,  $\varepsilon_{yy}$  s'anul·la i es té:

$$-k \phi_{dreta} - 0.1 a_L = 0$$

$$\phi_{dreta} = -\frac{0.1 a_L}{k}$$

Tenint en compte els paràmetres utilitzats, s'acaba obtenint  $\phi_{dreta} = -6.2 \cdot 10^{-3}$  V. Com es pot veure, la polarització calculada a partir de la condició de Neumann és la mateixa que el potencial elèctric obtingut després de resoldre el problema amb el mètode dels elements finits. Per tant, queda verificat que el mètode numèric codificat resol el problema del sensor correctament.

## 4.2 Actuador piezoelèctric

Ara, en comptes d'un sensor, es té un actuador piezoelèctric  $\Omega$  amb la mateixa forma i mida que el sensor de 4.1 ( $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ ) i recolzat de la mateixa manera en una paret. Al aplicar-li un potencial elèctric als punts del costat dret s'espera que el cos es deformi.

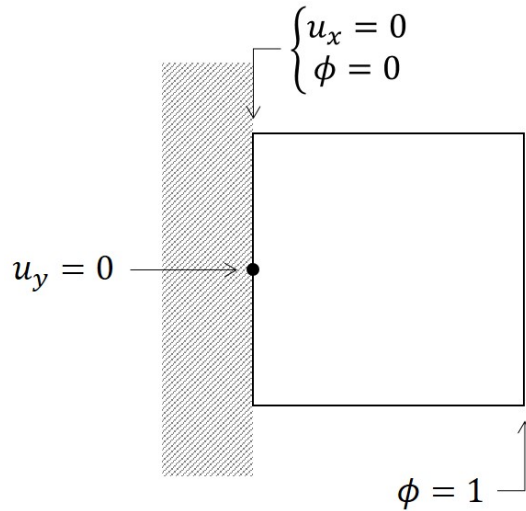


Figura 5: Plantejament del problema de l'actuador.

S'utilitzen els mateixos paràmetres que en 4.1 i s'apliquen les mateixes condicions de contorn, amb l'únic canvi que ara els punts del costat dret no varien de posició horitzontalment, sinó que es troben sota un potencial d'1 V.

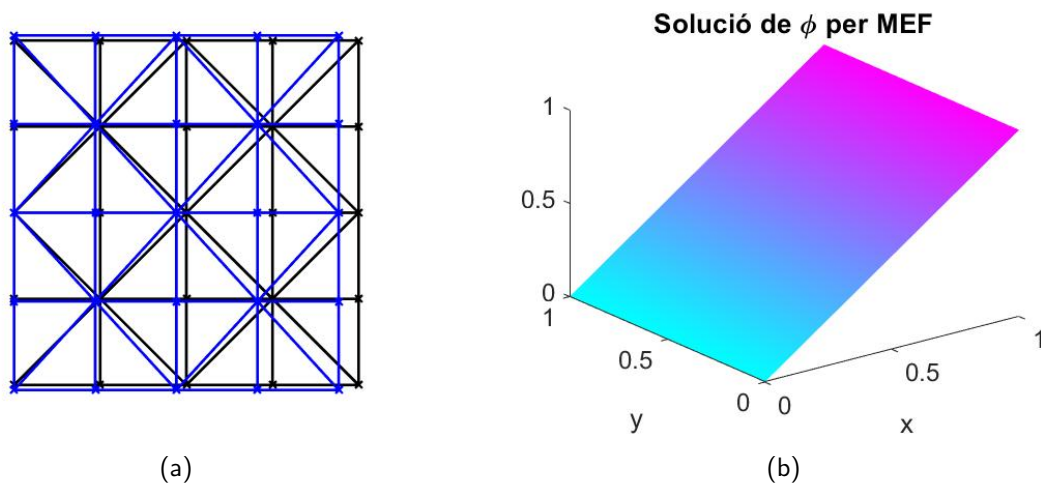


Figura 6: (a) Representació de l'actuador en la seva forma original (malla de color negre) i després d'aplicar el camp elèctric (malla de color blau), (b) Potencial elèctric sota el que està cada punt de l'actuador.

En aquest cas, en la Figura 6a es veu que el camp elèctric fa que la peça es deformi, allargant-se en la direcció vertical i escurçant-se en l'horitzontal, fent que els punts del lateral dret es moguin  $5.79 \cdot 10^{-2}$  m cap a l'esquerra. Sembla que la solució donada es comporta de manera correcta. Per acabar de verificar-ho, es té en compte la tensió induïda.

Per calcular la tensió induïda, primer es té en compte la condició de contorn homogènia que hi ha a l'aresta dreta i es desenvolupa:

$$\sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}$$

$$(\mathbf{C} \cdot \varepsilon(\mathbf{u}) + \mathbf{A} \cdot \nabla \phi) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}$$

$$\left( \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ 2\gamma_{xy} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_L & a_T & 0 \\ 0 & 0 & a_S \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} \end{bmatrix} \right) \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Tenint en compte que  $\nu = 0$ :

$$\begin{bmatrix} E\varepsilon_{xx} + a_L \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ E\varepsilon_{yy} + a_T \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ E\gamma_{xy} + a_S \frac{\partial \phi}{\partial y} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$E\varepsilon_{xx} + a_L \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$$

Com tot és uniforme, es té  $\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_{dreta} - \phi_{esquerra}}{L}$  i  $\varepsilon_{xx} = \frac{u_{x,dreta} - u_{x,esquerra}}{L}$ , on  $L$  és la longitud del costat, que en aquest cas és 1. Si se substitueixen els valors pels donats en el problema:

$$Eu_{x,dreta} + a_L = 0$$

$$u_{x,dreta} = -\frac{a_L}{E}$$

Si se substitueixen també els paràmetres, s'acaba obtenint  $u_{x,dreta} = -5.79 \cdot 10^{-2}$  m, que és el mateix valor que dona la solució numèrica del problema, ja que el signe negatiu indica que el moviment és cap a l'esquerra. Així que la modelització i discretització utilitzades resolen bé el problema de l'actuador.

## 5. Aplicació: vàlvula

Aprofitant la deformació que pateix el material piezoelèctric només aplicant-li un camp elèctric, sense necessitat d'estar a la vora d'ell ni tocar-lo físicament, una de les seves possibles aplicacions és per la creació de vàlvules, per exemple, d'ús mèdic.<sup>[5, 6]</sup>

Per a que una vàlvula compleixi la seva funció, cal que es corbi de manera suau per tal de deixar mobilitat a la substància que està bloquejant inicialment, ja sigui líquida o gaseosa. Per obtenir aquest tipus de comportament, cal combinar material piezoelèctric amb material elàstic en una mateixa peça. D'aquesta manera, quan la part piezoelèctrica es deformi, escurçant-se o allargant-se tant verticalment com horitzontalment, la part elàstica s'adaptarà al canvi fent que tot el conjunt es doblegui.

A continuació es faran dos exemples, un amb la combinació dels dos materials i un altre només amb material piezoelèctric. Així es podrà veure com influeix la presència del material elàstic i de quina manera fa que es doblegui la peça.

### 5.1 Model bimorph

Sigui un cos en forma de barra, amb la meitat esquerra feta de material piezoelèctric i amb la meitat dreta d'un material elàstic, recolzat verticalment sobre una superfície estàtica.

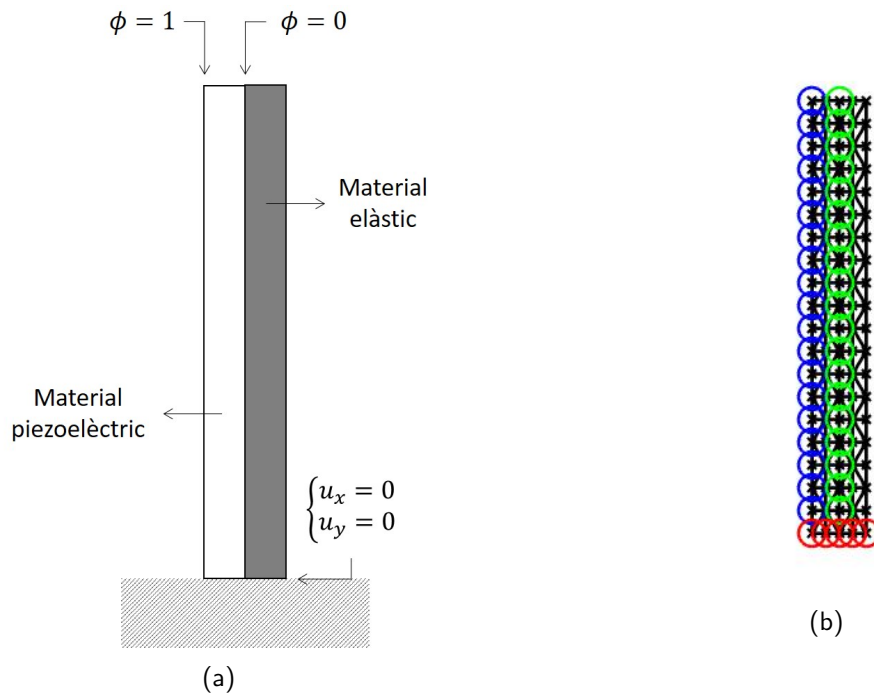


Figura 7: (a) Plantejament del problema *bimorph*, (b) Malla que discretitza la barra amb els punts del contorn de Dirichlet remarcats.

Les condicions de contorn donades són: els punts de la base estan immòbils, els punts de l'aresta esquerra tenen un potencial elèctric igual a 1 V i els punts de la línia vertical del mig no tenen res de potencial elèctric.

Executant el codi amb els mateixos paràmetres utilitzats en els exemples 4.1 i 4.2, s'arriba als resultats de la Figura 8. Es pot veure com la barra es corba cap a l'esquerra suaument i que només al material piezoelèctric li afecta el camp elèctric.

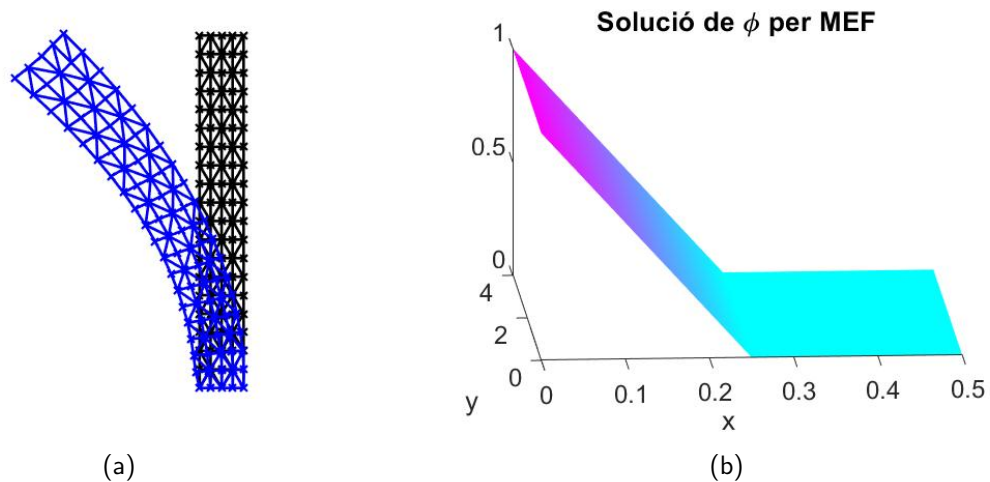


Figura 8: (a) Representació de la barra en la seva forma original (malla de color negre) i després d'aplicar el camp elèctric (malla de color blau), (b) Potencial elèctric sota el que està cada punt de la barra.

## 5.2 Model unimorph

Ara, es té una barra amb les mateixes dimensions que l'exemple de 5.1, però feta tota de material piezoelèctric. La seva base es troba en contacte amb una superfície estàtica. Com abans, s'imposa que la base està immòbil. Els punts del costat esquerre tenen un potencial elèctric de 2 V i els del dret no en tenen (Figura 9a). Els paràmetres utilitzats no varien respecte als de 5.1.

A l'aplicar el camp elèctric, la barra es fa més ampla en la direcció horitzontal i s'escurça verticalment (Figura 10a). A més, el camp elèctric afecta a tots els punts de la peça (Figura 10b).

Després de realitzar els experiments 5.1 i 5.2, es pot observar que l'aplicació de vàlvula és possible quan al material piezoelèctric se li afegeix una part elàstica que s'adapti a la deformitat de la part piezoelèctrica i faci que es flexioni la peça.

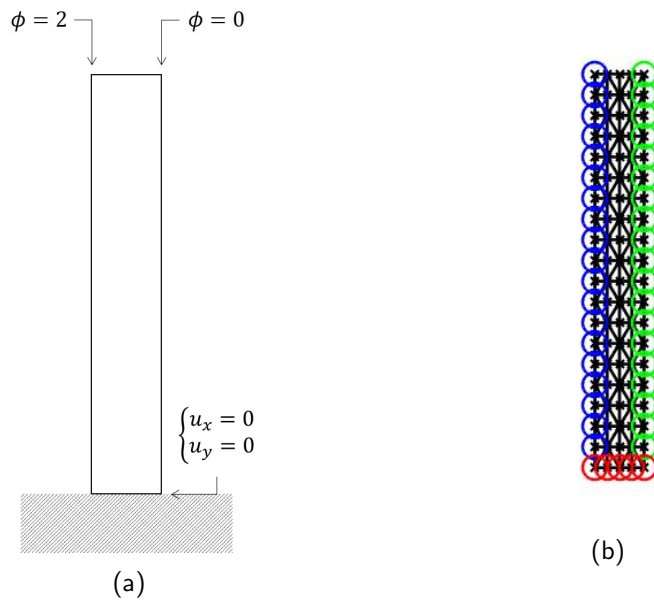


Figura 9: (a) Plantejament del problema *unimorph*, (b) Malla que discretitza la barra amb els punts del contorn de Dirichlet remarcats.

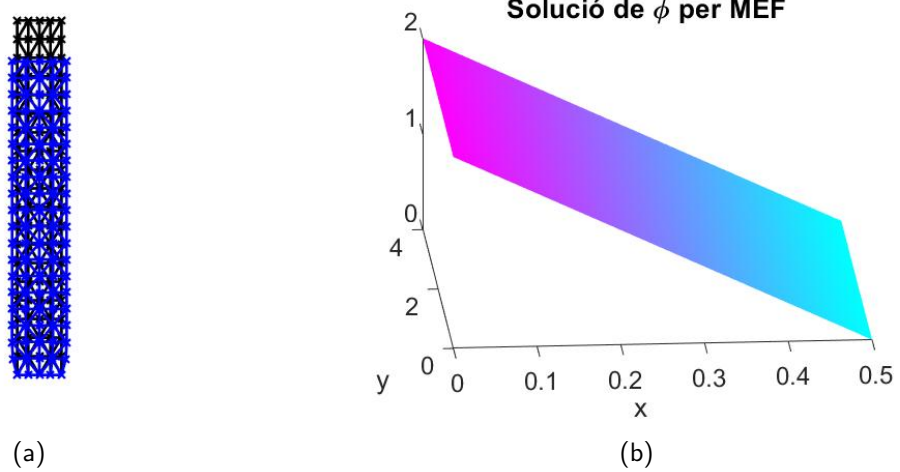


Figura 10: (a) Representació de la barra en la seva forma original (malla de color negre) i després d'aplicar el camp elèctric (malla de color blau), (b) Potencial elèctric sota el que està cada punt de la barra.

## 6. Canvi de direcció en el tensor piezoelèctric

Fins ara, s'ha considerat que la direcció principal del tensor piezoelèctric és la direcció de les abscisses. En aquesta secció s'explica com canviar el tensor per tal de modificar la seva direcció principal i es comprova que funciona correctament amb dos exemples.

Sigui  $\mathbf{R} = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} \\ r_{21} & r_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$  la matriu de rotació on  $\theta$  és l'angle girat respecte a l'eix d'abscisses i  $\tilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_{111} & \tilde{a}_{122} & \tilde{a}_{112} \\ \tilde{a}_{211} & \tilde{a}_{222} & \tilde{a}_{212} \end{bmatrix}$  el nou tensor piezoelèctric amb la direcció principal desitjada. Aleshores, les components es calculen d'aquesta manera:

$$\tilde{a}_{ijk} = r_{il}r_{jm}r_{kn}a_{lmn}$$

on  $a_{lmn}$  són les components del tensor piezoelèctric de les abscisses presentat en la secció 2.<sup>[4]</sup>

Per veure que el gir de l'orientació és el correcte, s'utilitzaran els dos exemples realitzats a l'apartat 5 però en les seves versions horitzontals i amb la paret a l'esquerra.

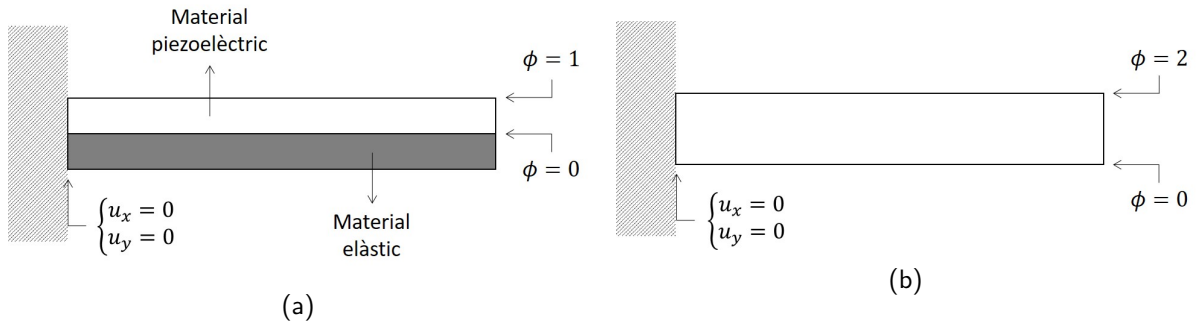


Figura 11: (a) Plantejament del problema *bimorph* horitzontal, (b) Plantejament del problema *unimorph* horitzontal.

Com es pot veure, les peces s'han girat  $270^\circ$  (sentit antihorari) respecte a les seves posicions originals. Per tant, el tensor piezoelèctric a utilitzar és  $\tilde{\mathbf{A}} = - \begin{bmatrix} 0 & 0 & a_S \\ a_T & a_L & 0 \end{bmatrix}$ . Amb tota la resta de paràmetres iguals als utilitzats en els exemples de l'apartat 5, s'obtenen els resultats de les Figures 12 i 13. La deformació de les peces i els potencials elèctrics obtinguts són els mateixos que en la versió dels exemples en vertical de la secció 5.

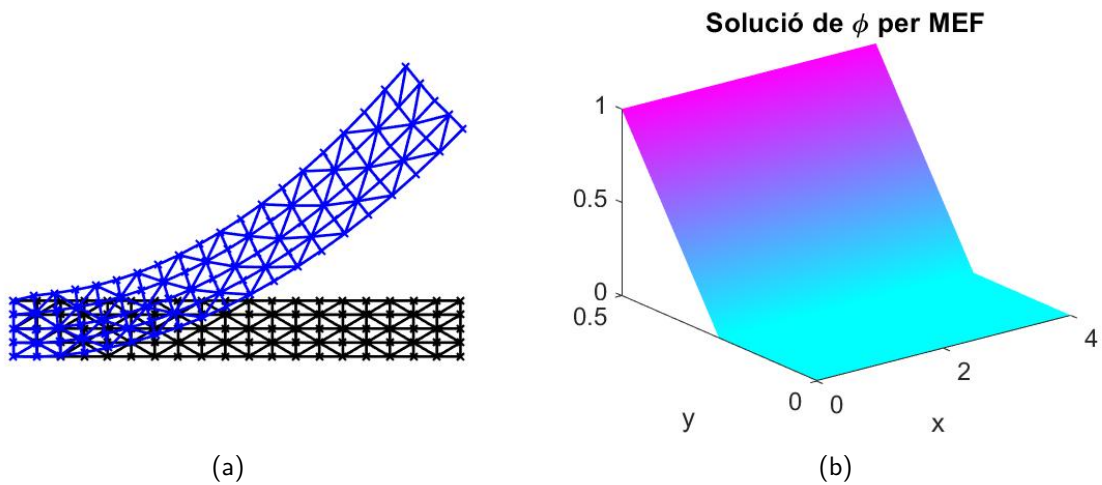


Figura 12: (a) Representació de la barra en la seva forma original (malla de color negre) i després d'aplicar el camp elèctric (malla de color blau), (b) Potencial elèctric sota el que està cada punt de la barra.

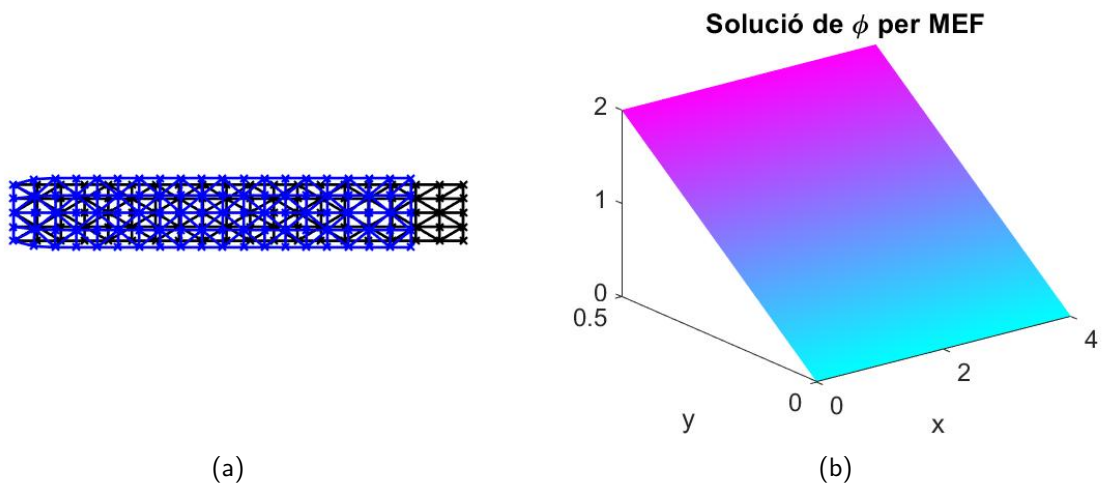


Figura 13: (a) Representació de la barra en la seva forma original (malla de color negre) i després d'aplicar el camp elèctric (malla de color blau), (b) Potencial elèctric sota el que està cada punt de la barra.



A continuació, es comprova que si no es té en compte el canvi de direcció principal de la piezoelectricitat i es deixa el tensor piezoelèctric original  $\mathbf{A}$ , els resultats no són els mateixos.

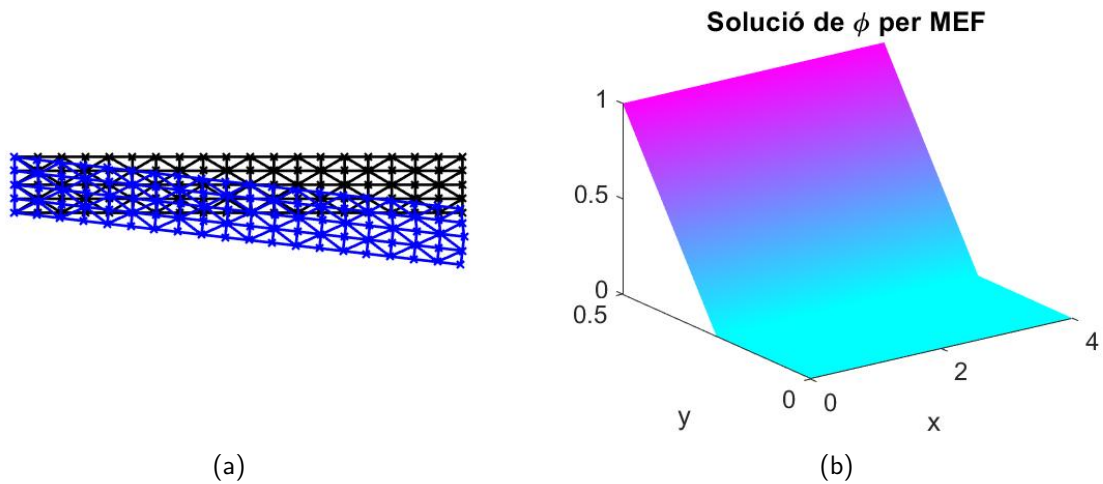


Figura 14: (a) Representació de la barra en la seva forma original (malla de color negre) i després d'aplicar el camp elèctric (malla de color blau), (b) Potencial elèctric sota el que està cada punt de la barra.

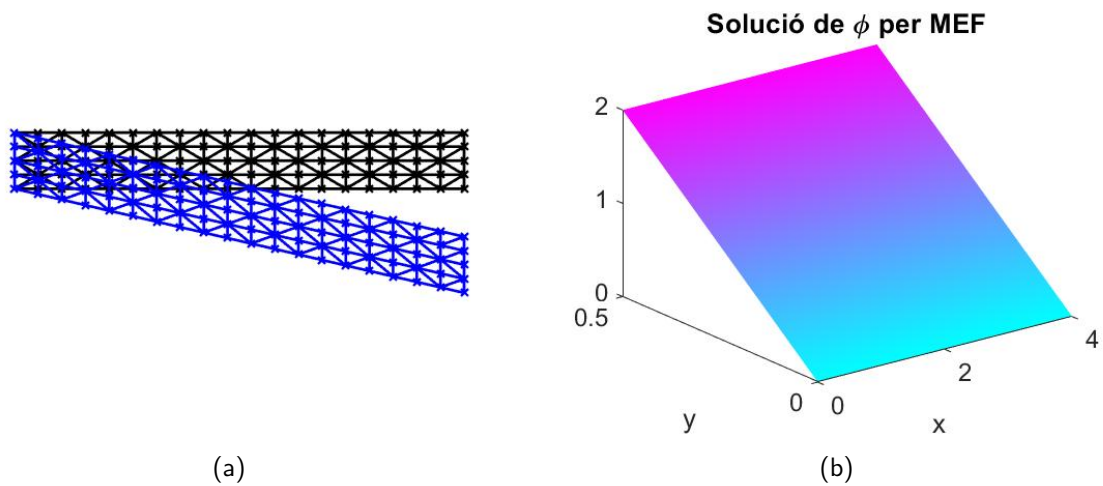


Figura 15: (a) Representació de la barra en la seva forma original (malla de color negre) i després d'aplicar el camp elèctric (malla de color blau), (b) Potencial elèctric sota el que està cada punt de la barra.

A partir de les Figures 14 i 15, es pot afirmar que la direcció en la que s'orienta el tensor piezoelèctric és important ja que en el cas de girar les peces piezoelèctriques, sempre s'espera obtenir els mateixos resultats, estiguin en la posició que estiguin.

## 7. Aplicació: cèl·lula fotovoltaica

Amb els apartats anteriors, s'han assolit els objectius marcats per a aquest treball. A partir d'aquí, s'aprofita el temps que queda per començar a estudiar una aplicació de la piezoelectricitat interessant: les cèl·lules fotovoltaïques piezoelèctriques.

Per poder transformar l'energia renovable proporcionada pel sol en energia elèctrica s'utilitzen els panells solars fotovoltaïcs. Aquests, estan compostats per petites peces semiconductores anomenades cèl·lules fotovoltaïques que basen el seu funcionament en l'efecte fotoelèctric, que és l'alliberament d'electrons per part d'un material quan incideixen en ell rajos de llum. En el moment que un electró és excitat per l'energia d'un fotó i comença a moure's lliurement, deixa en el seu lloc el que es coneix com un forat (quasipartícula amb càrrega positiva que també es pot desplaçar pel material). Quan un electró troba un forat diferent al que ha creat ell, s'ajunten i ambdós deixen de moure's.

Pel cas de les cel·les fotovoltaïques, és important evitar que un electró i un forat es trobin, ja que és el moviment dels electrons el que produeix un camp elèctric. Per aconseguir-ho, es crea una unió P-N en el material semiconductor del que està construïda la cèl·lula. Aquesta unió consisteix en dopar de forats una part del material (capa P) i en dopar-ne d'electrons l'altra part (capa N). L'excés de forats i electrons en les capes P i N, respectivament, fa que aparegui un camp elèctric entre les dues capes que redueix les possibles direccions en les que pot sortir disparat un electró o un forat, a una sola direcció. D'aquesta manera, quan fotons incideix en les capes interiors de la cel·la i separen alguns electrons dels seus respectius forats, els electrons es dirigeixen directament a la capa N i els forats cap a la capa P, en el sentit oposat que els electrons. Aquest comportament fa que s'obtingui una diferència de potencial, que s'emmagatzema per després, fer arribar aquest corrent elèctric a les cases, per exemple.

Durant els darrers anys, s'ha investigat la possibilitat d'utilitzar la piezoelectricitat en panells solars i s'ha descobert que millora l'eficiència d'aquests.<sup>[7]</sup> Si s'utilitza una peça piezoelèctrica en la versió de sensor, el camp elèctric que genera al estirar-la és una alternativa que es pot utilitzar per substituir la unió P-N que s'usa normalment. Així, no s'ha de dopar el material. Els resultats prometedors que s'estan obtenint, fan que s'ampliï la gamma de materials que es poden utilitzar per aplicacions de cèl·lules fotovoltaïques. A continuació, es farà un anàlisi matemàtic d'una cèl·lula fotovoltaica piezoelèctrica per investigar la possibilitat d'integrar aquest mecanisme a les plaques solars.

### 7.1 Modelització i discretització

Per aquest treball, la modelització utilitzada per estudiar el comportament de les cèl·lules fotovoltaïques sense piezoelectricitat, s'ha extret de les equacions presentades a [8], que modelen el comportament dels forats i dels electrons amb equacions de convecció-difusió.

Siguin  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ,  $p$  la densitat de forats,  $n$  la densitat d'electrons i  $\phi$  el potencial elèctric que hi ha a cada punt del cos. El model que segueix una cèl·lula fotovoltaica és:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (D_p \nabla p) - \nabla \cdot (\mu_p (\nabla \phi) p) = s_p \\ -\nabla \cdot (D_n \nabla n) + \nabla \cdot (\mu_n (\nabla \phi) n) = s_n \\ -\Delta \phi = \gamma(p - n) \end{cases} \quad \text{en } \Omega$$

on, en la primera equació,  $D_p$  és el coeficient de difusió dels forats,  $\mu_p$  és la mobilitat dels forats i  $s_p$  és una font de càrregues positives per unitat de volum, que generalment és zero però serà no nul en problemes sintètics per comprovar la convergència. En la segona equació, els paràmetres  $D_n$ ,  $\mu_n$  i  $s_n$  són els mateixos que en la primera, però, en aquest cas, relacionats amb els electrons.

Al afegir material piezoelèctric a la cel·la, la modelització manté les dues primeres equacions i canvia la tercera per les dues del model de la piezoelectricitat presentat a l'apartat 2. L'únic canvi que pateixen les equacions afegides és que la càrrega elèctrica lliure  $q$  de l'equació de l'equilibri elèctric se substitueix pel terme font de la tercera equació de la modelització d'una cèl·lula fotovoltaica sense piezoelectricitat.

Per tant, la modelització amb la que es treballarà queda de la següent manera:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (D_p \nabla p) - \nabla \cdot (\mu_p (\nabla \phi) p) = s_p \\ -\nabla \cdot (D_n \nabla n) + \nabla \cdot (\mu_n (\nabla \phi) n) = s_n \\ \nabla \cdot \hat{\sigma} + \mathbf{b} = \mathbf{0} \\ \nabla \cdot \hat{\mathbf{D}} - \gamma(p - n) = 0 \end{cases} \quad \text{en } \Omega \quad (7)$$

Les dues primeres equacions calculen  $p$  i  $n$  a partir d'una  $\phi$  ja donada, és a dir,  $\phi$  no és una incògnita sinó una dada. En canvi, en les dues últimes les dades són  $p$  i  $n$  i es calcula  $u$  i  $\phi$ .

El problema (7) es completa amb les condicions de Dirichlet i de Neumann

$$\begin{cases} p = p_D & \text{a } \Gamma_D^p \\ (-D_p \nabla p - \mu_p (\nabla \phi) p) \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{a } \Gamma_N^p \end{cases} \quad \text{on } \Gamma_D^p \cup \Gamma_N^p = \partial\Omega$$

$$\begin{cases} n = n_D & \text{a } \Gamma_D^n \\ (-D_n \nabla n + \mu_n (\nabla \phi) n) \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{a } \Gamma_N^n \end{cases} \quad \text{on } \Gamma_D^n \cup \Gamma_N^n = \partial\Omega$$

$$\begin{cases} \mathbf{u} = \mathbf{u}_D & \text{a } \Gamma_D^u \\ \hat{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} & \text{a } \Gamma_N^u \end{cases} \quad \text{on } \Gamma_D^u \cup \Gamma_N^u = \partial\Omega$$

$$\begin{cases} \phi = \phi_D & \text{a } \Gamma_D^\phi \\ \hat{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} & \text{a } \Gamma_N^\phi \end{cases} \quad \text{on } \Gamma_D^\phi \cup \Gamma_N^\phi = \partial\Omega$$

on  $\partial\Omega$  és la vora del cos,  $\mathbf{n}$  és el vector normal unitari i  $p_D$ ,  $n_D$ ,  $\mathbf{u}_D$  i  $\phi_D$  són dades donades inicialment.

En quant a les formes febles de les equacions del sistema a resoldre (7) i les seves discretitzacions, a continuació només es farà per una equació generalitzada, en representació de les dues primeres equacions de (7). En el cas de la tercera i la quarta, que modelen la piezoelectricitat, el procediment seria el mateix que el seguit a la secció 2 (amb els resultats finals (5) i (6)), tot i que canviant  $q$  per  $\gamma(p - n)$ .

Sigui l'equació generalitzada

$$-\alpha \Delta v - \beta \nabla \cdot ((\nabla \phi) v) = s \quad (8)$$

on  $\alpha = D_p$ ,  $\beta = \mu_p$ ,  $s = s_p$  i  $v = p$  si es parla de la primera equació del sistema (7). En canvi, si es tracta de la segona, els paràmetres són:  $\alpha = D_n$ ,  $\beta = -\mu_n$ ,  $s = s_n$  i  $v = n$ .

De la mateixa manera, les condicions de contorn d'ambdues equacions es generalitzen com

$$\begin{cases} v = v_D & \text{a } \Gamma_D^\nu \\ (-\alpha \nabla v - \beta (\nabla \phi) v) \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{a } \Gamma_N^\nu \end{cases} \quad \text{on } \Gamma_D^\nu \cup \Gamma_N^\nu = \partial\Omega \quad (9)$$

A continuació, es dedueix la forma feble del problema (8) amb condicions de contorn (9). Primer, es multiplica (8) per una funció test  $w$  qualsevol, i s'integra en  $\Omega$ .

$$-\alpha \int_{\Omega} w \Delta v \, d\Omega - \beta \int_{\Omega} w \nabla \cdot ((\nabla \phi) v) \, d\Omega = \int_{\Omega} w s \, d\Omega \quad \forall w$$

Després, s'aplica la fórmula d'integració per parts (4) als dos termes de la part esquerra de l'equació

$$\alpha \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla v \, d\Omega - \alpha \int_{\partial\Omega} w \nabla v \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma + \beta \int_{\Omega} \nabla w \cdot ((\nabla \phi) v) \, d\Omega - \beta \int_{\partial\Omega} w ((\nabla \phi) v) \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma = \int_{\Omega} w s \, d\Omega \quad \forall w$$

Finalment, s'apliquen les condicions de contorn (9). El segon i el quart terme s'anul·len degut a la condició de Neumann, i amb la condició de Dirichlet la forma feble resultant és

“Trobar  $v \in H^1(\Omega)$  tal que  $v = v_D$  en el contorn de Dirichlet  $\Gamma_D$  i

$$\alpha \int_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla v \, d\Omega + \beta \int_{\Omega} \nabla w \cdot ((\nabla \phi) v) \, d\Omega = \int_{\Omega} w s \, d\Omega \quad (10)$$

$\forall w \in H^1(\Omega)$  tal que  $w = 0$  a  $\Gamma_D$ .”

Ara, ja es pot procedir a discretitzar el problema generalitzat per tal d'aplicar el mètode dels elements finits i trobar una solució aproximada de la incògnita  $v$ . Sigui  $m$  el nombre de nodes que formen la malla que discretitza  $\Omega$ ,

$\mathbf{V} = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_m]^T$  el vector dels valors nodals de la densitat (ja sigui de forats o d'electrons),

$\mathbf{W} = [w_1 \ w_2 \ \dots \ w_m]^T$  el vector dels valors nodals de la funció de test  $w$  i

$\mathbf{N} = [N_1 \ N_2 \ \dots \ N_m]$  el vector de les funcions de forma.

Aleshores, la discretització queda:

$$v \approx \mathbf{N}\mathbf{V}, \quad w = \mathbf{N}\mathbf{W}, \quad \nabla v \approx (\nabla \mathbf{N})\mathbf{V}, \quad \nabla w = (\nabla \mathbf{N})\mathbf{W}$$

$$\text{on } \nabla \mathbf{N} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x} \\ \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial y} \end{bmatrix}.$$

Substituint aquests valors a la forma feble (10) i simplificant  $\mathbf{W}^T$  a ambdós costats de l'equació, es té

$$\alpha \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}^T \nabla \mathbf{N} \mathbf{V} \, d\Omega + \beta \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}^T (\nabla \phi) \mathbf{N} \mathbf{V} \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T s \, d\Omega \quad \forall w$$

Aquesta última equació, es pot expressar com

$$(\alpha \mathbf{K}_1 + \beta \mathbf{K}_2) \mathbf{V} = \mathbf{g} \quad (11)$$

$$\text{on } \mathbf{K}_1 = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}^T \nabla \mathbf{N} \, d\Omega, \quad \mathbf{K}_2 = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}^T (\nabla \phi) \mathbf{N} \, d\Omega \quad \text{i} \quad \mathbf{g} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T s \, d\Omega.$$

Com ja s'ha dit abans, pel seu càlcul,  $p$  i  $n$  depenen d'un valor donat de  $\phi$  i viceversa. Això fa que a l'aproximar els seus valors pel mètode dels elements finits, calgui iterar el càlcul de  $p$ ,  $n$ ,  $u$  i  $\phi$  fins que, per exemple, la  $\phi$  no variï més.

Per tant, la implementació del codi itera el procés descrit a continuació. Primer es fa el càlcul de les matrius i els vectors de (11) sense tenir en compte les condicions de Dirichlet, tant pels valors de  $\alpha$ ,  $\beta$  i  $s$  de l'equació que calcula la densitat de forats, com pels de l'equació de la densitat d'electrons. A continuació, es modifiquen els sistemes (11) segons les condicions de contorn de Dirichlet i es calculen els valors aproximats de  $p$  i de  $n$ . Després, se segueixen els passos acabats de descriure, però solucionant aquesta vegada el sistema (6) i trobant una aproximació de  $u$  i  $\phi$ .

## 7.2 Verificació del codi

Després d'escriure el codi per resoldre el sistema d'equacions en derivades parcials (7), toca comprovar amb un petit test que, donada una solució analítica, el mètode té la convergència quadràtica esperada. El procediment per fer-ho, serà el mateix que s'ha seguit a 3 per verificar el model i discretització de la piezoelectricitat.

Siguin  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$  i les següents funcions per les densitats dels forats i els electrons, els desplaçaments horitzontal i vertical i el potencial elèctric, que serviran com a solució analítica:

$$\begin{cases} p(x, y) = x^2y + y^3 \\ n(x, y) = x^2y + y^3 \\ u_x(x, y) = xy + 3 \\ u_y(x, y) = 2x^3 - y \\ \phi(x, y) = x^2 - y^2 \end{cases}$$

I també, siguin els paràmetres del material els següents:  $D_p = 1 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ ,  $\mu_p = 1 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ,  $D_n = 1 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ ,  $\mu_n = 1 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ,  $\gamma = 1$ ,  $E = 152 \text{ Pa}$ ,  $\nu = 0.33$ ,  $k = 1 \text{ J}\text{V}^{-2}\text{m}^{-1}$  i  $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 8.8 & -4.4 & 0 \\ 0 & 0 & 4.4 \end{bmatrix} \text{ J}\text{V}^{-1}\text{m}^{-2}$ .

Usant totes aquestes dades i el Maple (codis A.1 i A.2), els termes font del conjunt d'equacions resulten ser

$$s_p = -2x^2y - 8y + 6y^3$$

$$s_n = 2x^2y - 8y - 6y^3$$

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} -8.8 \\ -685.71x - 168.07 \end{bmatrix}$$

$$q = p - n = 0$$

Si s'afegeixen aquests valors a les dades anteriors, se substitueixen en el codi i s'executa aquest, de manera que a cada iteració la malla que discretitza el cos sigui més fina, aleshores les gràfiques d'evolució de l'error de les quatre incògnites a buscar són les de la Figura 16. Com ja s'esperava, les quatre rectes (les dues de la Figura 16a estan superposades) són de pendent 2, és a dir, dóna una convergència quadràtica per les quatre variables ( $p$ ,  $n$ ,  $u$  i  $\phi$ ).

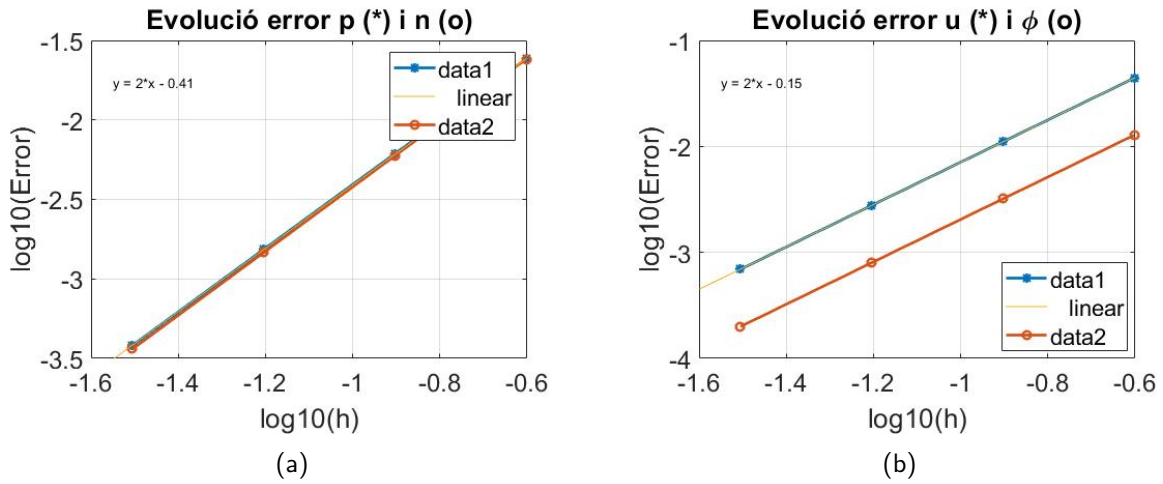


Figura 16: (a) Evolució de l'error de  $p$  (data1) i de l'error de  $n$  (data2), (b) Evolució de l'error d' $u$  (data1) i de l'error de  $\phi$  (data2).

## 8. Comentaris finals i conclusions

L'objectiu d'aquest treball ha estat estudiar la piezoelectricitat i el seu comportament a través del càlcul numèric i el mètode dels elements finits. Per aconseguir-ho, s'han realitzat, pas a pas, les següents tasques:

1 - Familiaritzar-se amb les equacions d'elasticitat lineal en mecànica de sòlids i la seva solució amb el mètode dels elements finits.

2 - Familiaritzar-se amb el comportament i la modelització dels materials piezoelèctrics.

El sistema d'equacions que modela la piezoelectricitat consisteix en l'acoblament d'una equació d'elasticitat lineal (part mecànica) i una de Poisson (part elèctrica) per tal de representar la dependència entre les tensions mecàniques i els camps elèctrics que caracteritza a un material piezoelèctric.

3 - Implementar i validar un codi MATLAB d'elements finits per les equacions de la piezoelectricitat.

4 - Visualitzar i interpretar els resultats de tractar una peça piezoelèctrica com un sensor o un actuator.

S'ha vist en un primer exemple que a l'aplicar una tensió sobre un material piezoelèctric, aquest crea un camp elèctric i, en un segon exemple, que a l'aplicar-li una diferència de potencial, aquest es deforma.

5 - Analitzar una possible aplicació com a vàlvula.

S'ha comprovat que per tal que la vàlvula es corbi com s'espera, cal que estigui formada per un material piezoelèctric unit a un material elàstic.

Donat el bon desenvolupament del treball s'ha pogut considerar una tasca addicional:

6 - Estudiar l'aplicació de la piezoelectricitat en plaques solars.

6.1 - Familiaritzar-se amb l'equació de convecció-difusió i la seva solució amb el mètode dels elements finits.

6.2 - Familiaritzar-se amb l'algorisme de solució escalonada (*staggered*).

6.3 - Familiaritzar-se amb el funcionament i la modelització d'una cèl·lula fotovoltaica.

6.4 - Implementar i validar un codi MATLAB d'elements finits per les equacions d'una cel·la fotovoltaica piezoelèctrica.

### 8.1 Conclusions i treball futur

El mètode dels elements finits proporciona eines computacionals d'utilitat per a l'estudi i disseny de dispositius basats en la piezoelectricitat. En particular, l'aplicació al disseny de cèl·lules fotovoltaïques està actualment en desenvolupament.

Com a feina futura es podrien fer exemples realistes en base a la modelització i discretització presentades al final d'aquest treball. Aquests exemples són complicats ja que poden presentar problemes amb la presència de fronts verticals o no convergir amb el mètode d'iteració utilitzat.

## 8.2 Aprenentatge personal

Gràcies a aquest treball he descobert el fenomen de la piezoelectricitat i les múltiples aplicacions en les que es pot aprofitar l'efecte electromecànic acoblat que presenta. A més a més, durant el desenvolupament d'aquest estudi, he pogut aplicar coneixements adquirits en les assignatures del grau relacionades amb el càlcul numèric i ampliar-los encara més.

Finalment, m'ha semblat molt interessant veure de primera mà com és un procés de recerca i la quantitat d'assajos i errors que implica abans d'aconseguir els resultats desitjats.



## 9. Referències

- [1] S.J. Rupitsch. *Piezoelectric Sensors and Actuators. Fundamentals and Applications*, Springer, 2019.
- [2] Q.H. Qin. *Advanced Mechanics of Piezoelectricity*, Springer, 2013.
- [3] CECOS University. *Piezoelectric gas lighter*, <http://piezolighter.weebly.com/>. (Vist el 25 de juny de 2020)
- [4] D. Codony, O. Marco, S. Fernández-Méndez, I. Arias. An immersed boundary hierarchical B-spline method for flexoelectricity, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. Vol. **354**, setembre 2019, pàgines 750–782.
- [5] FESTO. *Válvulas proporcionales con tecnología piezoeléctrica en la técnica médica*, [https://www.festo.com/net/SupportPortal/Files/446508/Valvulas\\_proporcionales\\_con\\_tecnologia\\_piezoelectrica\\_en\\_la\\_tecnica\\_medica.pdf](https://www.festo.com/net/SupportPortal/Files/446508/Valvulas_proporcionales_con_tecnologia_piezoelectrica_en_la_tecnica_medica.pdf). (Vist el 25 de juny de 2020)
- [6] PI Ceramic. *Piezo Valves in Biotechnology, MedTech and Diagnostics*, <https://www.piceramic.com/en/applications/medical-technology/piezo-valves-in-biotechnology/>. (Vist el 25 de juny de 2020)
- [7] G. Hu, W. Guo, R. Yu, X. Yang, R. Zhou, C. Pan, Z.L. Wang. Enhanced performances of flexible ZnO/perovskite solar cells by piezo-phototronic effect, *Nano Energy*. Vol. **23**, maig 2016, pàgines 27–33.
- [8] Y. Zhou, A. Gray-Weale. A numerical model for charge transport and energy conversion of perovskite solar cells *Physical Chemistry Chemical Physics*. Vol. **18(6)**, desembre 2015, pàgines 4476–4486.

## A. Codis de Maple

### A.1 Càlcul de $\mathbf{b}$ i $q$

```
> restart;
> ux:=sin(x^2*y); uy:=2*x^3-y*x; phi:=y^2-x;
> eps_xx:=diff(ux,x); eps_yy:=diff(uy,y); eps_xy:=(diff(uy,x)+diff(ux,y))/2;
  phi_x:=diff(phi,x); phi_y:=diff(phi,y);
> sigma1_xx:=A*((1-nu)*eps_xx+nu*eps_yy);
  sigma1_yy:=A*((1-nu)*eps_yy+nu*eps_xx);
  sigma1_xy:=A*(1-2*nu)*eps_xy;
> sigma2_xx:=8.8*phi_x;
  sigma2_yy:=(-4.4)*phi_x;
  sigma2_xy:=4.4*phi_y;
> sigma_xx:=sigma1_xx + sigma2_xx;
  sigma_yy:=sigma1_yy + sigma2_yy;
  sigma_xy:=sigma1_xy + sigma2_xy;
> segd1:=8.8*eps_xx-4.4*eps_yy; segd2:=4.4*2*eps_xy;
> D1:=-k*phi_x+segd1; D2:=-k*phi_y+segd2;
> q:=simplify(diff(D1,x)+diff(D2,y));
> b_1:=-simplify(diff(sigma_xx,x)+diff(sigma_xy,y));
  b_2:=-simplify(diff(sigma_xy,x)+diff(sigma_yy,y));
```

El codi anterior està implementat pel càlcul de  $\mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$  i  $q$  de l'apartat 3. En el cas que es vulgui fer el càlcul de la subsecció 7.2, cal canviar els valors del desplaçament i del potencial elèctric (segona línia de codi) per

```
> ux:=x*y+3; uy:=2*x^3-y; phi:=x^2-y^2;
```

### A.2 Càlcul de $s_p$ i $s_n$

```
> restart;
> phi:=x^2-y^2; E1:=-diff(phi,x); E2:=-diff(phi,y); p:=x^2*y+y^3; n:=p;
> p_x:=diff(p,x); p_y:=diff(p,y); n_x:=diff(n,x); n_y:=diff(n,y);
> term1_1_p:=alpha*p_x; term1_2_p:=alpha*p_y;
  term2_1_p:=beta*E1*p; term2_2_p:=beta*E2*p;
  term1_1_n:=alpha*n_x; term1_2_n:=alpha*n_y;
  term2_1_n:=beta*E1*n; term2_2_n:=beta*E2*n;
> s_p:= - diff(term1_1_p,x) - diff(term1_2_p,y) +
  diff(term2_1_p,x) + diff(term2_2_p,y);
  s_n:= - diff(term1_1_n,x) - diff(term1_2_n,y) -
  diff(term2_1_n,x) - diff(term2_2_n,y);
```

## B. Codis de MATLAB

Els codis implementats s'han basat en el conjunt de fitxers que resolen una equació de Poisson en dues dimensions pel mètode dels elements finits, proporcionat per la directora del treball. En aquest annex s'adjunten només els fitxers més importants: les implementacions de les modelitzacions i els càlculs de les matrius i els vectors dels sistemes a resoldre.

En el cas de B.1 i B.2, a l'executar el codi principal s'obtenen els resultats de l'exemple del sensor. Si es vol fer funcionar per la resta d'exemples, cal comentar i descomentar les línies de l'exemple específic en les zones on hi ha marcat un canvi o una activació o desactivació de unes quantes línies del codi.

### B.1 Fitxer principal del codi piezoelèctric

```
clear; close all; clc

% PREPROCES
% Element de referencia
typeOfElement=1; % 1=triangle , 0=quadrat
load referenceElements; theReferenceElement=referenceElement.p1; degree=theReferenceElement.degree;
nOfElementNodes = size(theReferenceElement.N,2);

n = [4,8,16,32];
h = zeros(1,4);
L2errorU = zeros(1,4);
L2errorP = zeros(1,4);

% % ----- CANVI -----
% for i=1:4 % Comprovacio del codi
for i=1 % Sensor, actuador, barres

h(i) = 1/n(i);

% % ----- CANVI -----
% % Malla comprovacio del codi, sensor i actuador
[X,T] = CreateMesh(1,nOfElementNodes,[0,1,0,1],degree*n(i)+1,degree*n(i)+1);
% % Malla barra vertical
% [X,T] = CreateMesh(1,nOfElementNodes,[0,0.5,0,4],degree*n(i)+1,4*(degree*n(i)+1));
% % Malla barra horitzontal
% [X,T] = CreateMesh(1,nOfElementNodes,[0,4,0,0.5],4*(degree*n(i)+1),degree*n(i)+1);

figure(1).clf
PlotMesh(T,X,typeOfElement,'k-');

% % ----- CANVI BARRES amb MATERIAL ELASTIC -----
% % Barra VERTICAL: calcul punt mig de cada element i separacio entre element esquerre o dret
% nOfElements = size(T,1);
% PuntMigElement = zeros(nOfElements,3);
% PuntMigDreta = zeros(nOfElements/2,3);
% numDreta = 1;
% PuntMigEsq = zeros(nOfElements/2,3);
% numEsq = 1;
% for i=1:nOfElements
%     Te=T(i,:); % indexos dels nodes de l'element
%     Xe=X(Te,:); % coordenades dels nodes de l'element
%     PuntMigElement(i,:) = [i,sum(Xe)/3];
%     if PuntMigElement(i,2) > 0.25
%         PuntMigDreta(numDreta,:) = PuntMigElement(i,:);
%         numDreta = numDreta + 1;
%     else
%         PuntMigEsq(numEsq,:) = PuntMigElement(i,:);
%         numEsq = numEsq + 1;
%     end
% end
% hold on, plot(PuntMigDreta(:,2),PuntMigDreta(:,3),'r*');
% plot(PuntMigEsq(:,2),PuntMigEsq(:,3),'g*'); hold off
%
% % 0 si l'element esta en el material elastic
% % 1 si l'element esta en el material piezoelectric
% IsPiezo = zeros(nOfElements,1);
% IsPiezo(PuntMigEsq(:,1)) = 1;

% % Barra HORIZONTAL: calcul punt mig de cada element i separacio entre element superior o inferior
% nOfElements = size(T,1);
% PuntMigElement = zeros(nOfElements,3);
% PuntMigSup = zeros(nOfElements/2,3);
```

## Solució pel mètode dels elements finits de materials electroactius

```
% numSup = 1;
% PuntMigInf = zeros(nOfElements/2,3);
% numInf = 1;
% for i=1:nOfElements
%     Te=T(i,:); % indexos dels nodes de l'element
%     Xe=X(Te,:); % coordenades dels nodes de l'element
%     PuntMigElement(i,:) = [i,sum(Xe)/3];
%     if PuntMigElement(i,3) > 0.25
%         PuntMigSup(numSup,:) = PuntMigElement(i,:);
%         numSup = numSup + 1;
%     else
%         PuntMigInf(numInf,:) = PuntMigElement(i,:);
%         numInf = numInf + 1;
%     end
% end
% hold on, plot(PuntMigSup(:,2),PuntMigSup(:,3),'r*');
% plot(PuntMigInf(:,2),PuntMigInf(:,3),'g*'); hold off
%
% 0 si l'element esta en el material elastic
% 1 si l'element esta en el material piezoelectric
% IsPiezo = zeros(nOfElements,1);
% IsPiezo(PuntMigSup(:,1)) = 1;
%
%
% Definicio de les condicions de contorn de Dirichlet
x = X(:,1); y = X(:,2); tol=1.e-10;
% ----- CANVI -----
% Comprovacio del codi
% nodesB = find(abs(x)<tol|abs(x-1)<tol|abs(y)<tol|abs(y-1)<tol);
% hold on, plot(x(nodesB),y(nodesB),'bo','MarkerSize',16); hold off
% nodesCCD = [nodesB;nodesB+size(X,1);nodesB+2*size(X,1)];
% uCCDx=DirichletValueX(X(nodesB,:));
% uCCDy=DirichletValueY(X(nodesB,:));
% uCCDphi=DirichletValue(X(nodesB,:));
% uCCD=[uCCDx;uCCDy;uCCDphi];

% % SENSOR
nodesBx1 = find(abs(x)<tol);
nodeBx1mig = nodesBx1((n(i)/2)+1);
nodesBx2 = find(abs(x-1)<tol);
nodesCCD = [nodesBx1;nodesBx2;nodeBx1mig+size(X,1);nodesBx1+2*size(X,1)];
hold on, plot(x(nodesBx1),y(nodesBx1),'bo','MarkerSize',16,'LineWidth',2);
plot(x(nodeBx1mig),y(nodeBx1mig),'go','MarkerSize',16,'LineWidth',2);
plot(x(nodesBx2),y(nodesBx2),'ro','MarkerSize',16,'LineWidth',2); hold off
uCCDx1mig.y = zeros(size(nodeBx1mig,1),1);
uCCDx1.x = zeros(size(nodesBx1,1),1);
uCCDx2.x = (-0.1)*ones(size(nodesBx2,1),1);
uCCDx1.phi = zeros(size(nodesBx1,1),1);
uCCD = [uCCDx1.x;uCCDx2.x;uCCDx1mig.y;uCCDx1.phi];

% % ACTUADOR
nodesBx1 = find(abs(x)<tol);
nodeBx1mig = nodesBx1((n(i)/2)+1);
nodesBx2 = find(abs(x-1)<tol);
nodesCCD = [nodesBx1;nodeBx1mig+size(X,1);nodesBx1+2*size(X,1);nodesBx2+2*size(X,1)];
hold on, plot(x(nodesBx1),y(nodesBx1),'bo','MarkerSize',16,'LineWidth',2);
plot(x(nodeBx1mig),y(nodeBx1mig),'go','MarkerSize',16,'LineWidth',2);
plot(x(nodesBx2),y(nodesBx2),'ro','MarkerSize',16,'LineWidth',2); hold off
uCCDx1mig.y = zeros(size(nodeBx1mig,1),1);
uCCDx1.x = zeros(size(nodesBx1,1),1);
uCCDx1.phi = zeros(size(nodesBx1,1),1);
uCCDx2.phi = 1*ones(size(nodesBx2,1),1);
uCCD = [uCCDx1.x;uCCDx1mig.y;uCCDx1.phi;uCCDx2.phi];

% % BIMORPH VERTICAL
nodesBx1 = find(abs(x)<tol);
nodesBx2 = find(abs(x-0.25)<tol);
nodesBy1 = find(abs(y)<tol);
nodesCCD = [nodesBy1;nodesBy1+size(X,1);nodesBx1+2*size(X,1);nodesBx2+2*size(X,1)];
hold on, plot(x(nodesBx1),y(nodesBx1),'bo','MarkerSize',16,'LineWidth',2);
plot(x(nodesBx2),y(nodesBx2),'go','MarkerSize',16,'LineWidth',2);
plot(x(nodesBy1),y(nodesBy1),'ro','MarkerSize',16,'LineWidth',2); hold off
uCCDy1.x = zeros(size(nodesBy1,1),1);
uCCDy1.y = zeros(size(nodesBy1,1),1);
uCCDx1.phi = ones(size(nodesBx1,1),1);
uCCDx2.phi = zeros(size(nodesBx2,1),1);
uCCD = [uCCDy1.x;uCCDy1.y;uCCDx1.phi;uCCDx2.phi];

% % UNIMORPH VERTICAL
nodesBx1 = find(abs(x)<tol);
nodesBx2 = find(abs(x-0.5)<tol);
nodesBy1 = find(abs(y)<tol);
nodesCCD = [nodesBy1;nodesBy1+size(X,1);nodesBx1+2*size(X,1);nodesBx2+2*size(X,1)];
hold on, plot(x(nodesBx1),y(nodesBx1),'bo','MarkerSize',16,'LineWidth',2);
plot(x(nodesBx2),y(nodesBx2),'go','MarkerSize',16,'LineWidth',2);
plot(x(nodesBy1),y(nodesBy1),'ro','MarkerSize',16,'LineWidth',2); hold off
uCCDy1.x = zeros(size(nodesBy1,1),1);
uCCDy1.y = zeros(size(nodesBy1,1),1);
uCCDx1.phi = 2*ones(size(nodesBx1,1),1);
```

```

% uCCDx2_phi = zeros( size(nodesBx2,1),1);
% uCCD = [uCCDy1_x;uCCDy1_y;uCCDx1_phi;uCCDx2_phi];

% % BIMORPH HORIZTONTAL
% nodesBx1 = find(abs(x)<tol);
% nodesBy1 = find(abs(y-0.25)<tol);
% nodesBy2 = find(abs(y-0.5)<tol);
% nodesCCD = [nodesBx1;nodesBx1+size(X,1);nodesBy1+2*size(X,1);nodesBy2+2*size(X,1)];
% hold on, plot(x(nodesBx1),y(nodesBx1),'bo','MarkerSize',16,'LineWidth',2);
% plot(x(nodesBy1),y(nodesBy1),'go','MarkerSize',16,'LineWidth',2);
% plot(x(nodesBy2),y(nodesBy2),'ro','MarkerSize',16,'LineWidth',2); hold off
% uCCDx1_x = zeros(size(nodesBx1,1),1);
% uCCDx1_y = zeros(size(nodesBx1,1),1);
% uCCDy1_phi = zeros(size(nodesBy1,1),1);
% uCCDy2_phi = ones(size(nodesBy2,1),1);
% uCCD = [uCCDx1_x;uCCDx1_y;uCCDy1_phi;uCCDy2_phi];

% % UNIMORPH HORIZTONTAL
% nodesBx1 = find(abs(x)<tol);
% nodesBy1 = find(abs(y)<tol);
% nodesBy2 = find(abs(y-0.5)<tol);
% nodesCCD = [nodesBx1;nodesBx1+size(X,1);nodesBy1+2*size(X,1);nodesBy2+2*size(X,1)];
% hold on, plot(x(nodesBx1),y(nodesBx1),'bo','MarkerSize',16,'LineWidth',2);
% plot(x(nodesBy1),y(nodesBy1),'go','MarkerSize',16,'LineWidth',2);
% plot(x(nodesBy2),y(nodesBy2),'ro','MarkerSize',16,'LineWidth',2); hold off
% uCCDx1_x = zeros(size(nodesBx1,1),1);
% uCCDx1_y = zeros(size(nodesBx1,1),1);
% uCCDy1_phi = zeros(size(nodesBy1,1),1);
% uCCDy2_phi = 2*ones(size(nodesBy2,1),1);
% uCCD = [uCCDx1_x;uCCDx1_y;uCCDy1_phi;uCCDy2_phi];
% %

% % ----- CANVI -----
% E=152; nu=0.33; % Comprovacio del codi
E=152; nu=0; % Sensor, actuador, barres

C=matrixC(E,nu);

% Sistema d'equacions sense condicions de contorn
% ----- CANVI -----
% % Comprovacio del codi
% [K,f]=computeSystem(X,T,theReferenceElement,C,@sourceTermb,@sourceTermq,0);
% % Sensor, actuador, barra unimorph
[K,f]=computeSystem(X,T,theReferenceElement,C,[0;0],0,0);
% % Barra bimorph
% [K,f]=computeSystem(X,T,theReferenceElement,C,[0;0],0,1sPiezo);

% Condictions de contorn i Solucio del sistema
% Reduccio del sistema
unknowns= setdiff([1:3*size(X,1)],nodesCCD);
f = f(unknowns)-K(unknowns,nodesCCD)*uCCD;
K=K(unknowns,unknowns);
% Solucio del sistema
sol=K\f;
% Valors nodals (Solucio del sistema + Valors de Dirichlet)
u = zeros(3*size(X,1),1);
u(unknowns) = sol; u(nodesCCD) = uCCD;

% POSTPROCES
% % ----- ACTIVAR per SENSOR, ACTUADOR i BARRES -----
figure(2)
PlotNodalField(u(2*size(X,1)+1:size(u,1)),X,T), title('Solucio de \phi per MEF')
xlabel('x');
ylabel('y');
set(gca,'FontSize',18);
% %

L2errorX=computeL2errorX(u(1:size(X,1)),X,T,theReferenceElement);
L2errorY=computeL2errorY(u(size(X,1)+1:2*size(X,1)),X,T,theReferenceElement);
L2errorPhi=computeL2error(u(2*size(X,1)+1:size(u,1)),X,T,theReferenceElement);
L2errorU(i)=sqrt(L2errorX^2+L2errorY^2);
L2errorP(i)=L2errorPhi;
end

% % ----- ACTIVAR per COMPROVACIO del CODI -----
% figure(3)
% plot(log10(h),log10(L2errorU),'*--','LineWidth',2);
% hold on
% plot(log10(h),log10(L2errorP),'o--','LineWidth',2);
% grid on
% title('Evolucio error u (*) i \phi (o)');
% xlabel('log10(h)');
% ylabel('log10(Error)');
% set(gca,'FontSize',18);

% % ----- ACTIVAR per SENSOR, ACTUADOR i BARRES -----
Xdef = X + [u(1:size(X,1)),u(size(X,1)+1:2*size(X,1))];
figure(4), clf
PlotMesh(T,X,typeOfElement,'k-'); hold on;

```

```
PlotMesh(T,Xdef,typeOfElement,'b-')
```

## B.2 Càlcul del sistema piezoelèctric

```
function [K,f]=computeSystem(X,T,theReferenceElement,C,sourceTermFunction1,sourceTermFunction2, Separador)

IPweights = theReferenceElement.IPweights;
IPcoord = theReferenceElement.IPcoordinates;
N=theReferenceElement.N;
Nxi=theReferenceElement.Nxi;
Neta=theReferenceElement.Neta;

nOfNodes = size(X,1);
nOfElements = size(T,1);

Kuu=spalloc(2*nOfNodes,2*nOfNodes,9*nOfNodes);
Kup=spalloc(2*nOfNodes,nOfNodes,9*nOfNodes);
Kpp=spalloc(nOfNodes,nOfNodes,9*nOfNodes);
f1=zeros(2*nOfNodes,1);
f2=zeros(nOfNodes,1);

% Bucle en els elements
for i=1:nOfElements
    Te=T(i,:); % indexos dels nodes de l'element
    Te2=[Te,Te+nOfNodes];

% ----- CANVI -----
%     SepEl = Separador(i); % Barra BIMORPH
%     SepEl = 0; % Altrament

    Xe=X(Te,:); % coordenades dels nodes de l'element
    [Ke_uu,Ke_up,Ke_pp,fe_1,fe_2]=elementalComputations(Xe,IPweights,N,Nxi,Neta,C,sourceTermFunction1,sourceTermFunction2,
        SepEl);
    % Acoblament matrius i vectors elementals
    Kuu(Te2,Te2)=Kuu(Te2,Te2)+Ke_uu;
    Kup(Te2,Te)=Kup(Te2,Te)+Ke_up;
    Kpp(Te,Te)=Kpp(Te,Te)+Ke_pp;
    f1(Te2) = f1(Te2) + fe_1;
    f2(Te) = f2(Te) + fe_2;
end

K = [Kuu,Kup;Kup',Kpp];
f = [f1;f2];

% -----
% Calcul matrius i vectors elementals
function [Ke_uu,Ke_up,Ke_pp,fe_1,fe_2]=elementalComputations(Xe,IPweights,N,Nxi,Neta,C,sourceTermFunction1,
    sourceTermFunction2, SeparadorElement)

nnodes = size(Xe,1);
Ke_uu=zeros(2*nnodes);
Ke_up=zeros(2*nnodes,nnodes);
Ke_pp=zeros(nnodes);
fe_1=zeros(2*nnodes,1);
fe_2=zeros(nnodes,1);
xe = Xe(:,1); ye = Xe(:,2);

% Bucle en els punts d'integració
for k=1:length(IPweights)
    Nk=N(k,:);
    Nkxi=Nxi(k,:);
    Nketa=Neta(k,:);
    xk = Nk*Xe;
    % Jacobia
    J = [Nkxi*xe Nkxi*ye;Nketa*xe Nketa*ye];
    % Derivades de les funcions de forma respecte a (x,y)
    Nkxy = J\[Nkxi;Nketa];
    Nkx = Nkxy(1,:); Nky = Nkxy(2,:);
    % Diferencial de volum
    dxy=IPweights(k)*det(J);

    Dk=[Nk,zeros(1,length(Nk));zeros(1,length(Nk)),Nk];
    Sk=[Nkx,zeros(1,length(Nkx));zeros(1,length(Nky)),Nky;Nky,Nkx];
    Gk=Nkxy;
    j = 141;

    Ke_uu = Ke_uu - Sk'*C*Sk*dxy;
    Ke_pp = Ke_pp + Gk'*j*Gk*dxy;

% ----- CANVI -----
%     Ke_up = Ke_up - Sk'*SeparadorElement*matrixA'*Gk*dxy; % Barra BIMORPH
%     Ke_up = Ke_up - Sk'*matrixA'*Gk*dxy; % Altrament

% ----- CANVI -----
% % Comprovació del codi
%     fe_1 = fe_1 - Dk'*sourceTermFunction1(xk)*dxy;
```

```

% fe_2 = fe_2 + Nk'*sourceTermFunction2(xk)*dxy;
% % Sensor, actuator, barres
fe_1 = fe_1 - Dk'*sourceTermFunction1*dxy;
fe_2 = fe_2 + Nk'*sourceTermFunction2*dxy;
end

```

## B.3 Fitxer principal del codi de la cèl·lula fotovoltaica piezoelèctrica

```

clear; close all; clc

% DADES
CoeficientDifusio_p= 1; Mobilitat_p = 1;
CoeficientDifusio_n= 1; Mobilitat_n = 1;

% PREPROCES
% Element de referencia
typeOfElement = 1;
degree = 1; theReferenceElement = createReferenceElementTri(degree);
nOfElementNodes = size(theReferenceElement.N,2);

n = [4,8,16,32];
h = zeros(1,4);
pL2error = zeros(1,4);
nL2error = zeros(1,4);
L2error = zeros(1,4);
phiL2error = zeros(1,4);
uL2error = zeros(1,4);

for i = 1:4
    h(i) = 1/n(i);
    % Malla
    [X,T] = CreateMesh(1,nOfElementNodes,[0,1,0,1],degree*n(i)+1,degree*n(i)+1);

    % Definició de les condicions de contorn de Dirichlet
    x = X(:,1); y = X(:,2); tol=1.e-10;

    nodesCCD = find(abs(x)<tol|abs(x-1)<tol|abs(y)<tol|abs(y-1)<tol);
    nodesP = nodesCCD; nodesN = nodesCCD;
    nodesB = [nodesCCD;nodesCCD+size(X,1);nodesCCD+2*size(X,1)];
    uCCDp = DirichletValue_p(X(nodesP,:));
    uCCDn = DirichletValue_n(X(nodesN,:));
    uCCDphi = DirichletValue_phi(X(nodesCCD,:));
    uCCDx=DirichletValueX(X(nodesCCD,:));
    uCCDy=DirichletValueY(X(nodesCCD,:));
    uCCD=[uCCDx;uCCDy;uCCDphi];

    % Valor de phi inicial
    phiOrig = DirichletValue_phi(X);
    [phi_x,phi_y] = computeGradientSmoothing(phiOrig,X,T,theReferenceElement);
    CampElectric = [-phi_x,-phi_y];

    count_phi = 0;
    count_while = 0;

    while count_phi < 1

        % CALCUL DE P i N, donat PHI
        % Sistema d'equacions sense condicions de contorn
        [C_p,A_p,f_p]=computeMatrices(@sourceTerm_p,X,T,theReferenceElement,CampElectric);
        [C_n,A_n,f_n]=computeMatrices(@sourceTerm_n,X,T,theReferenceElement,CampElectric);

        K_p = CoeficientDifusio_p*A_p + Mobilitat_p*C_p;
        K_n = CoeficientDifusio_n*A_n - Mobilitat_n*C_n;

        % Condicions de contorn i Solució del sistema
        % Reducció del sistema
        unknownsP= setdiff([1:size(X,1)],nodesP);
        unknownsN= setdiff([1:size(X,1)],nodesN);
        f_p = f_p(unknownsP)-K_p(unknownsP,nodesP)*uCCDp;
        K_p=K_p(unknownsP,unknownsP);
        f_n = f_n(unknownsN)-K_n(unknownsN,nodesN)*uCCDn;
        K_n=K_n(unknownsN,unknownsN);
        % Solució del sistema
        sol_p=K_p\f_p;
        sol_n=K_n\f_n;
        % Valors nodals (Solució del sistema + Valors de Dirichlet)
        P = zeros(size(X,1),1); P(unknownsP)=sol_p; P(nodesP)=uCCDp;
        N = zeros(size(X,1),1); N(unknownsN)=sol_n; N(nodesN)=uCCDn;

        % CALCUL DE U i PHI, donades P i N
        E=152; nu=0.33;
        C=matrixC(E,nu);

        % Sistema d'equacions sense condicions de contorn
    end
end

```

## Solució pel mètode dels elements finits de materials electroactius

```
[K_u_phi, f_u_phi] = computeSystem(X,T,theReferenceElement,C,@sourceTerm_u,P,N);

% Condicions de contorn i Solucio del sistema
% Reduccio del sistema
unknowns= setdiff([1:3*size(X,1)],nodesB);
f_u_phi = f_u_phi(unknowns)-K_u_phi(unknowns,nodesB)*uCCD; K_u_phi=K_u_phi(unknowns,unknowns);
% Solucio del sistema
sol_u_phi=K_u_phi\f_u_phi;
% Valors nodals (Soluci del sistema + Valors de Dirichlet)
u_phi = zeros(3*size(X,1),1);
u_phi(unknowns) = sol_u_phi; u_phi(nodesB) = uCCD;

u = u_phi(1:2*size(X,1));
% Nova phi amb la que tornar a calcular P i N
phi = u_phi(2*size(X,1)+1:size(u_phi,1));

[phi_x, phi_y] = computeGradientSmoothing(phi,X,T,theReferenceElement);
CampElectric = [-phi_x,-phi_y];

% Si la nova phi es igual a l'anterior, es para
if count_while ~= 0
    if norm(phi-phi_ant)/norm(phi) < tol
        count_phi = count_phi + 1;
    end
end

phi_ant = phi;

count_while = count_while + 1;
end

pL2error(i) = computeL2error_p(P,X,T,theReferenceElement);
nL2error(i) = computeL2error_n(N,X,T,theReferenceElement);
xL2error = computeL2errorX(u(1:size(X,1)),X,T,theReferenceElement);
yL2error = computeL2errorY(u(size(X,1)+1:2*size(X,1)),X,T,theReferenceElement);
phiL2error(i) = computeL2error_phi(phi,X,T,theReferenceElement);
uL2error(i)=sqrt(xL2error^2+yL2error^2);
end

figure(1)
plot(log10(h),log10(uL2error),'*-','LineWidth',2);
hold on
plot(log10(h),log10(phiL2error),'o-','LineWidth',2);
grid on
title('Evolucio error u (*) i \phi (o)');
xlabel('log10(h)');
ylabel('log10(Error)');
set(gca,'FontSize',18);
figure(2)
plot(log10(h),log10(pL2error),'*-','LineWidth',2);
hold on
plot(log10(h),log10(nL2error),'o-','LineWidth',2);
grid on
title('Evolucio error p (*) i n (o)');
xlabel('log10(h)');
ylabel('log10(Error)');
set(gca,'FontSize',18);
```

## B.4 Càlcul del sistema de convecció-difusió

```
function [C,A,f]=computeMatrices(sourceTermFunction,X,T,theReferenceElement,CE)

IPweights = theReferenceElement.IPweights;
IPcoord = theReferenceElement.IPcoord;
N=theReferenceElement.N;
Nxi=theReferenceElement.Nxi;
Neta=theReferenceElement.Neta;

nOfNodes = size(X,1);
nOfElements = size(T,1);

C=spalloc(nOfNodes,nOfNodes,9*nOfNodes);
A=spalloc(nOfNodes,nOfNodes,9*nOfNodes);
f=zeros(nOfNodes,1);

% Bucle en els elements
for i=1:nOfElements
    Te=T(i,:); % indexos dels nodes de l'element
    Xe=X(Te,:); % coordenades dels nodes de l'element
    CE_e=CE(Te,:);
    [Ce,Ae,fe]=elementalComputations(sourceTermFunction,Xe,CE_e,IPweights,N,Nxi,Neta);
    % Acoblament matrius i vector elementals
    A(Te,Te)=A(Te,Te)+Ae;
    C(Te,Te)=C(Te,Te)+Ce;
    f(Te) = f(Te) + fe;
end
```



```

%-----
% Calcul matrius i vector elementals
function [Ce, Ae, fe]=elementalComputations(sourceTermFunction ,Xe, CE_e, IPweights ,N, Nxi , Neta)

nnodes = size(Xe,1);
Ae=zeros(nnodes);
Ce=zeros(nnodes);
fe=zeros(nnodes,1);
xe = Xe(:,1); ye = Xe(:,2);

% Bucle en els punts d'integracio
for k=1:length(IPweights)
    Nk=N(k,:);
    Nkxi=Nxi(k,:);
    Nketa=Neta(k,:);
    xk = Nk*Xe;
    CEk = Nk*CE_e;
    % Jacobia
    J = [Nkxi*xk Nkxi*ye; Nketa*xk Nketa*ye];
    % Derivades de les funcions de forma respecte a (x,y)
    Nkxy = J\[Nkxi;Nketa];
    Nkx = Nkxy(1,:); Nky = Nkxy(2,:);
    % Diferencial de volum
    dxy=IPweights(k)*det(J);

    % Matrius i vector elementals
    Ae = Ae + Nkxy'*Nkxy*dxy;
    Ce = Ce - Nkxy'*(CEk'*Nk)*dxy;
    fe = fe + Nk'*sourceTermFunction(xk)*dxy;
end

```

## B.5 Càlcul del sistema piezoelèctric de la cèl·lula fotovoltaica

```

function [K, f]=computeSystem(X,T, theReferenceElement ,C, sourceTermFunction1 ,p,n)

IPweights = theReferenceElement.IPweights;
IPcoord = theReferenceElement.IPcoord;
N=theReferenceElement.N;
Nxi=theReferenceElement.Nxi;
Neta=theReferenceElement.Neta;

nOfNodes = size(X,1);
nOfElements = size(T,1);

Kuu=spalloc(2*nOfNodes,2*nOfNodes,9*nOfNodes);
Kup=spalloc(2*nOfNodes,nOfNodes,9*nOfNodes);
Kpp=spalloc(nOfNodes,nOfNodes,9*nOfNodes);
f1=zeros(2*nOfNodes,1);
f2=zeros(nOfNodes,1);

% Bucle en els elements
for i=1:nOfElements
    Te=T(i,:); % indexos dels nodes de l'element
    Te2=[Te,Te+nOfNodes];
    Xe=X(Te,:); % coordenades dels nodes de l'element
    p_e=p(Te,:);
    n_e=n(Te,:);

    [Ke_uu, Ke_up, Ke_pp, fe_1, fe_2]=elementalComputations(Xe, IPweights ,N, Nxi ,Neta ,C, sourceTermFunction1 , p_e , n_e);
    % Acoblament matrius i vectors elementals
    Kuu(Te2,Te2)=Kuu(Te2,Te2)+Ke_uu;
    Kup(Te2,Te)=Kup(Te2,Te)+Ke_up;
    Kpp(Te,Te)=Kpp(Te,Te)+Ke_pp;
    f1(Te2) = f1(Te2) + fe_1;
    f2(Te) = f2(Te) + fe_2;
end

K = [Kuu, Kup; Kup', Kpp];
f = [f1; f2];

%-----
% Calcul matrius i vector elementals
function [Ke_uu, Ke_up, Ke_pp, fe_1, fe_2]=elementalComputations(Xe, IPweights ,N, Nxi ,Neta ,C, sourceTermFunction1 , p_e , n_e)

nnodes = size(Xe,1);
Ke_uu=zeros(2*nnodes);
Ke_up=zeros(2*nnodes,nnodes);
Ke_pp=zeros(nnodes);
fe_1=zeros(2*nnodes,1);
fe_2=zeros(nnodes,1);
xe = Xe(:,1); ye = Xe(:,2);

% Bucle en els punts d'integracio
for k=1:length(IPweights)
    Nk=N(k,:);

```

## Solució pel mètode dels elements finits de materials electroactius

```

Nkxi=Nxi(k,:);
Nketa=Neta(k,:);
xk = Nk*Xe;
pk = Nk*p_e;
nk = Nk*n_e;
%Jacobia
J = [Nkxi*x_e Nkxi*y_e;Nketa*x_e Nketa*y_e];
% Derivades de les funcions de forma respecte a (x,y)
Nkxy = J\[Nkxi;Nketa];
Nkx = Nkxy(1,:); Nky = Nkxy(2,:);
% Diferencial de volum
dxy=IPweights(k)*det(J);

Dk=[Nk,zeros(1,length(Nk));zeros(1,length(Nk)),Nk];
Sk=[Nkx,zeros(1,length(Nkx));zeros(1,length(Nky)),Nky;Nky,Nkx];
Gk=Nkxy;

Ke_uu = Ke_uu - Sk'*C*Sk*dxy;

j = 1;
Ke_up = Ke_up - Sk'*matrixA'*Gk*dxy;
Ke_pp = Ke_pp + Gk'*j*Gk*dxy;

gamma = 1;
fe_1 = fe_1 - Dk'*sourceTermFunction1(xk)*dxy;
fe_2 = fe_2 + Nk'*gamma*(pk-nk)*dxy;
end

```